



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI

BU L L E T I N  
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI  
JANA MARKA MARCI

Číslo 125

prosinec 2004

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: [immss@spektroskopie.cz](mailto:immss@spektroskopie.cz)

telefonní číslo sekretariátu: 233 332 343

#### **P.F. 2005**

*Předsednictvo Spektroskopické společnosti a redakční rada Bulletinu přeje všem členům do Nového roku štěstí, zdraví a hodně úspěchů v práci i v osobním životě.*

*Těšíme se na Vaši účast na našich akcích a očekáváme Vaše náměty k další činnosti Společnosti.*

#### **Čtenářům Bulletinu**

Na schůzi hlavního výboru Společnosti, která se konala 1. prosince 2004, bylo konstatováno, že Bulletin je od č. 124 vydáván a rozeslán i v elektronické formě (formát PDF). Zájemci o tuto formu Bulletinu se mohou přihlásit v sekretariátu Společnosti elektronickou poštou a uvést e-mailovou adresu, na kterou chtějí Bulletin nadále zasílat. Od č. 126 bude každému členu dle jeho přání zasílána pouze jedna forma – tištěná nebo elektronická. Výhodou elektronické formy je prakticky okamžité dodání čísla po jeho vyjití a dále také možnost promptně zasílat na e-mailové adresy členů aktuální informace o konferencích, seminářích či jiných akcích, které v Bulletinu, vzhledem k jeho dvouměsíční periodicitě, již nemohou být zařazeny. Hlavní výbor předpokládá, že se tak zlepší kontakt se členy Společnosti.

Předsednictvo hlavního výboru Spektroskopické společnosti dále žádá členy, aby průběžně oznamovali sekretariátu změny telefonních čísel, případně změny v názvu zaměstnavatele nebo v poštovní či elektronické adrese. Změny lze sdělit sekretariátu telefonicky nebo elektronickou poštou (tel. 233 332 343; [immss@spektroskopie.cz](mailto:immss@spektroskopie.cz)). Děkujeme.

## **Schůze Hlavního výboru Spektroskopické společnosti JMM**

Dne 1. prosince se na VŠCHT v Praze konala 78. schůze Hlavního výboru Společnosti, na jejímž programu bylo přednesení zpráv o činnosti předsednictva za uplynulé období, o hospodaření Společnosti, o odborné činnosti v roce 2004 a o připravovaných akcích v roce 2005.

Hlavní akce Společnosti v roce 2004 byly (v závorce uveden hlavní garant a počet účastníků):

- Kurz měření vibračních spekter (Prof. Volka, 28)
- Kurz interpretace vibračních spekter (Prof. Volka, 23)
- Kurz kvantitativní molekulové spektroskopie (Prof. Volka, 9)
- Seminář rentgenové spektrometrie (RNDr. Macháček, 50)
- Seminář IAA 04 (Ing. Vobecký, 34)
- 4. Kurz ICP spektroskopie s přehledem metod analýzy povrchů (Prof. Kanický, 47)
- 7. škola hmotnostní spektrometrie (Doc. Havlíček, 162)
- 4. seminář o metodách blízkého pole (RNDr. Zemek, 54).

Členové Společnosti se podíleli na české verzi slovníku IUPAC, která se stane součástí elektronického slovníku připravovaného Ústavem analytické chemie VŠCHT.

Výše členského příspěvku pro kolektivní členy Společnosti byla pro rok 2005 stanovena na 1 500,- Kč. Šesti kolektivním členům bylo ukončeno členství pro opakované neplacení členských příspěvků.

Samostatným bodem programu schůze byly prezentace autorů prací přihlášených do soutěže mladých spektroskopiků a vyhlášení výsledků soutěže.

V kategorii A (diplomové práce) byly uděleny ceny:

1. cena Mgr. Miloslavu Poláškoví,
2. cena Mgr. Janu Kratzerovi,
3. cena Ing. Janu Polákovi.

V této kategorii byly dále hodnoceny práce Ing. Roberta Jirásko z katedry analytické chemie FCHT Univerzity Pardubice a Ing. Miroslava Lísy z téhož pracoviště.

V kategorii B (publikovaná původní práce nebo soubor prací) byly uděleny ceny:

1. cena RNDr. Vladimíru Kopeckému Jr., PhD.,
2. cena Mgr. Petru Manovi,
3. cena Mgr. Dr. Filipu Kadlecovi.

Dále byly v kategorii B hodnoceny práce Ing. Petra Halady z Mikrobiologického ústavu AV ČR, RNDr. Martina Kubala, PhD. z Fyzikálního ústavu MFF UK, Ing. Barbory Maralíkové, PhD. z Fyziologického ústavu AV ČR a RNDr. Petra Nováka, PhD. z Mikrobiologického ústavu AV ČR.

Abstrakta oceněných prací přinášíme dále. Seznam příslušných bibliografických citací je možno vyžádat na adrese [s.pradna@centrum.cz](mailto:s.pradna@centrum.cz) (Dr. Přádná).

### **Konference LIBS 2004**

**28. 9. – 1. 10. 2004, Torremolinos, Španělsko**

*Karel Novotný*

Konference věnovaná spektroskopii laserem buzeného plazmatu LIBS (Laser Induced Breakdown Spectroscopy) se konala letos ve španělském letovisku Torremolinos poblíž Malagy. Byla to v pořadí již třetí mezinárodní konference věnovaná této problematice po konferencích LIBS 2000 pořádané v italské Pise a LIBS 2002 konané v Orlandu na Floridě.

Konference se konala v luxusním hotelu Amaragua, který se nachází v komplexu hotelů obklopujících pláž La Carihuela. Poblíž hotelu, který byl podobně jako další okolní hotely vybaven venkovním bazénem s výhledem na moře, se nacházela řada restaurací s výbornou španělskou kuchyní a samotná pláž poskytovala možnost opalování a koupání v moři. Načasování konference bylo ideální, neboť teploty se tu přes den pohybovaly mezi příjemnými 27 – 30 stupni a počet lidí na plážích díky končící sezóně byl již přijatelný. O tom, že španělská riviéra je během léta zřejmě přeplněna turisty svědčí mnoho rozestavěných hotelů, které jsou tu vidět takřka na každém kroku.

Přednášky probíhaly v jedné sekci, takže každý účastník mohl postihnout všechna sdělení, která ho zajímala, a měl i dost času na prohlídku asi stovky posterů, které byly vystaveny během celé konference. Jediným nedostatkem byla poněkud nedokonalá akustika přednáškového sálu, takže ne všem přednášejícím bylo dostatečně rozumět. Do sálu se ale cca 160 účastníků pohodlně vešlo a i opozdilci trousící se během přednášek měli možnost se pohodlně usadit, aniž by rušili.

Z nabitého programu stojí za zmínku přednášky K. Niemaxe na téma *Femtosecond-LIBS – Are there advantages over nanosecond-LIBS?*, R. Russoa na téma *Properties of plasmas based on dual-pulse (nanosecond and femtosecond) configurations* nebo S. Palanca na téma *Pulse energy requirements for remote analysis with LIBS beyond the 100 meter range*.

Zajímavé byly také přednášky věnované možnostem využití LIBS v kosmickém výzkumu či při detekci kovů pod vodou (aplikace pro archeologický průzkum objektů na mořském dně) a dále také přednášky věnované vývoji mobilních a přenosných zařízení.

Kromě vědeckého programu měli účastníci konference možnost i neformálních setkání, např. během návštěvy Gibralfaro Castle v Malaze nebo během společné večeře pořádané na závěr taktéž v Malaze.

Příští konference LIBS 2006 se bude konat v kanadském Montrealu. Sborník abstrakt konference LIBS 2004 v elektronické podobě je možné vyžádat u účastníka K. Novotného na adrese: [codl@sci.muni.cz](mailto:codl@sci.muni.cz).

## **Zpráva o 4. semináři o metodách blízkého pole**

### **4. – 6. 10. 2004, Lázně Bohdaneč**

*Karel Jurek*

Semináře o metodách blízkého pole se zúčastnili 53 pracovníci nejen z daného oboru, ale i zájemci o uvedené metody. Program semináře začal v pondělí odpoledne a skončil ve středu v poledne.

Přednášky zahrnovaly jak dnes již klasické metody tunelovací mikroskopie a pokroky v tomto oboru, tak také jejich netradiční využití. Přehlednou přednášku na toto téma přednesl Tomáš Šikola z FSI VUT Brno, dále následovaly zajímavé aplikace ve studiu struktury a topografie povrchů, možnosti lokálních chemických reakcí, atd. Nechyběly ani teoretické přednášky (František Máca z Fyzikálního ústavu AV ČR) vysvětlující fyzikální podstatu jevů využívaných při tunelovací mikroskopii a také problémy při interpretaci výsledků experimentů. Zajímavou přednášku přednesl Pavel Sobotík z Fyzikálního ústavu AV ČR na téma rastrovací tunelová spektroskopie. V této přednášce ukázal možnosti lokálního studia elektronové struktury povrchů pomocí spektroskopie tunelových proudů. Řada dalších přednášek ze zabývala různými praktickými aplikacemi uvedených metod, což svědčí o tom, že přestávají být vyhrazené několika úzce zaměřeným specialistům, ale stávají se stále běžnějšími.

Seminář se konal v příjemném prostředí hotelu Technik v Lázních Bohdaneč za předsednictví Václava Hulínského, o technické zajištění a hladký průběh se zasloužil sekretář semináře Josef Zemek z Fyzikálního ústavu AV ČR, zajímavý program sestavil Ivan Ošťádal z MFF Praha.

Účastníci semináře vesměs ohodnotili jeho vysokou úroveň a shodli se na potřebě dalších podobných seminářů v budoucnu.

## Vzpomínka na profesora Stegera z Drážďan

*Bohuslav Strauch*

V červnu 2004 zemřel profesor Dr. rer. nat. habil. Walter Eberhard Steger, dlouholetý šéf Ústavu speciální analytické chemie a spektroskopie Technické univerzity v Drážďanech, nositel medaile Jana Marka Marci (1984).

Rodák (1925) ze saského příhraničního městečka Sebnitz studoval po válce chemii na TU Dresden u prof. Artura Simona, výrazné osobnosti před- i poválečné molekulové spektroskopie. Na pracovišti se pěstovala Ramanova spektroskopie zejména anorganických látek a zde byly též vývojové začátky infračervené absorpční spektroskopie, uváděné pak do výroby firmou Carl Zeiss, Jena. Vzpomeňme jen na kdysi známý přístroj UR 10 a na pozdější různé Specordy.

Dr. Steger, následník prof. Simona, studoval pomocí vibračních spekter struktury různých sloučenin fosforu včetně cyklických fosfátů, se spolupracovníky se zabýval vibračními spektry krystalických látek a metodicky rozvíjel různé postupy při měření infračervených a Ramanových spekter ve vývojové spolupráci s firmou Zeiss, např. snímání spekter za různých teplot. Z tehdejšího ústavu anorganické chemie TU Dresden však jako nestraník vlivem politických tlaků musel počátkem 60. let odejít, nicméně se pustil do budování ústavu speciální analytické chemie a spektroskopie, kde byla dominantně pěstována molekulová spektroskopie (IČ a Raman) a pracoviště se v těchto oborech záhy stalo školicím střediskem, jež přesahovalo tehdejší NDR. Probíhaly zde kurzy IČ a Ramanovy spektroskopie, jichž se postupně účastnila řada československých pracovníků, členů naší Společnosti. Díky smluvně zajištěné meziuniverzitní spolupráci docházelo k řadě výměnných pobytů a oboustranných účastí na různých konferencích, seminářích a dalších odborných zasedáních v průběhu 70. a 80. let. Drážďanští kolegové se za tehdy obtížných technických podmínek, panujících ve východním bloku, úporně snažili o procesní počítačové zpracování měřených dat.

Naše participace vyvrcholila v létě 1989 na XIX. EUCMOS, konaném v Drážďanech, v jehož čele stál prof. Steger s jeho pozdějším následníkem, Dr. Reinerem Salzerem. Prof. Steger shodou okolností prožíval naše listopadové události v roce 1989 s námi. Přijel dva dny před 17. listopadem na krátký studijní pobyt a zažil na Albertově stávkující studenty a celou tehdejší revoluční atmosféru.

Kromě rozsáhlých a hlubokých vědomostí v přírodních vědách byl profesor Steger známý svými znalostmi z historie, architektury a umění, byl pověstným znalcem českých hradů a zámků včetně jejich minulosti a systematicky je navštěvoval. Znali jsme ho jako skromného, noblesního intelektuála. Pro mne osobně byl nejednou inspirací včetně jeho lidského přístupu.

*Čest jeho památce!*

**ABSTRAKTA PRACÍ**  
**oceněných v soutěži mladých spektroskopiků**

**Kategorie A – diplomové práce**

**NMR studie komplexů pyridin-N-oxidového analogu DOTA s lanthanoidy<sup>1</sup>**

*Miloslav Polášek*

*Katedra anorganické chemie, PřF UK (školitel: Doc. RNDr. Petr Hermann, Dr.)*

Tomografie magnetické rezonance neboli MRI („Magnetic Resonance Imaging“) je bouřlivě se rozvíjející neinvazivní diagnostická metoda. Tato metoda je založena na nukleární magnetické rezonanci a slouží především k zobrazování měkkých tkání s vysokým obsahem vody. Pro dosažení kvalitnějšího obrazu je výhodné použít tzv. kontrastní látky, což jsou nejčastěji komplexy polydentátních organických ligandů s paramagnetickými ionty, zejména  $Gd^{3+}$ . Aby byly tyto komplexy použitelné jako kontrastní látky, musejí ve svých fyzikálně-chemických vlastnostech splňovat celou řadu podmínek. Účinnost kontrastních látek je měřena schopností urychlovat relaxaci jader  $^1H$  molekul vody, což se označuje jako relaxivita. Samotná relaxivita je dále ovlivňována řadou dalších parametrů, které lze „ladit“ vhodnými úpravami struktury ligandu.

Tato práce popisuje syntézu nového makrocyclického polydentátního ligandu  $H_3DO_3A$ -pyNox a zabývá se studiem vlastností jeho komplexů s lanthanoidy z hlediska požadavků kladených na kontrastní látky pro MRI. Pomocí série relaxometrických experimentů bylo u gadolinitého komplexu zjištěno, že molekula vody vázaná na ion  $Gd^{3+}$  podléhá optimálně rychlé výměně s okolním roztokem, což je jeden z kritických parametrů u kontrastních látek<sup>2</sup>. Dále bylo z  $^1H$  NMR spekter komplexů vybraných lanthanoidů zjištěno, že všechny tyto komplexy existují v roztocích pouze ve formě jednoho izomeru namísto rovnovážné směsi dvou izomerů, jež je obvyklá u komplexů podobných ligandů. Tyto izomery jsou z historických důvodů označovány jako „M“ a „m“ a odlišují se jak ve své struktuře, tak ve vlastnostech. Ačkoliv je izomer „m“ u gadolinitých komplexů zpravidla minoritní složkou, je díky výrazně rychlejší výměně koordinované molekuly vody zodpovědný za většinu výsledné relaxivity. Ze srovnání změřených  $^1H$  NMR spekter s literaturou bylo zjištěno, že v případě komplexů ligandu  $H_3DO_3A$ -pyNox je v roztoku přítomen pouze izomer „M“. Struktura tohoto izomeru byla následně potvrzena i v pevném stavu pomocí rentgenové difrakce, a to ve všech případech, kdy se podařilo připravit monokrystalický vzorek (komplexy  $Nd^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$  a  $Yb^{3+}$ ). Spojením výše uvedených výsledků lze konstatovat, že optimální rychlost výměny vody v případě gadolinitého komplexu ligandu  $H_3DO_3A$ -pyNox přísluší výhradně izomeru „M“. Z toho vyplývá, že při vývoji kontrastních látek pro MRI je možno požadovaných vlastností docílit vhodnou úpravou organického ligandu i u izomeru „M“, který byl doposud považován za nežádoucí a byla snaha jeho podíl ve směsi minimalizovat.

<sup>1</sup>Polášek M., Rudovský J., Hermann P., Lukeš I., Vander Elst L., Muller R.N.: Lanthanide(III) complexes of a pyridine *N*-oxide analogue of DOTA: Exclusive *M* isomer formation induced by a six-membered chelate ring. *Chem. Commun.* **2004**, 2602 – 2603.

<sup>2</sup>Merbach A.E., Toth E. *The Chemistry of Contrast Agents in Medical Magnetic Resonance Imaging*. JOHN WILEY & SONS, Chichester 2001.

## **Nový přístup k prekoncentraci antimonu: záchyt stibanu na křemenném povrchu s následným stanovením metodou AAS**

*Mgr. Jan Kratzer*

*Katedra analytické chemie PŘF UK a Ústav analytické chemie AV ČR*

*(školitel: Doc. RNDr. Petr Rychlovský, CSc., PŘF UK, konzultant: RNDr. Jiří Dědina, CSc., Ústav analytické chemie AV ČR)*

Diplomová práce studuje možnost prekoncentrace antimonu na křemenném povrchu před jeho stanovením metodami atomové spektrometrie. Chemicky generovaný stiban byl zakoncentrován a po uvolnění stanoven metodou AAS s atomizací v křemenném (multi)atomizátoru.

Nejprve byla ke studiu použita aparatura se samostatně vyhřívanou křemennou pastí oddělenou od vyhřívaného multiatomizátoru. Záchytu a uvolnění bylo dosaženo změnou teploty pasti a koncentrace vodíku v nosném plynu. Výrazný teplotní gradient mezi pastí a atomizátorem měl negativní vliv na účinnost prekoncentrace a opakovatelnost měření. Proto byla navržena integrovaná aparatura, kde samostatně vyhřívaná past byla součástí přívodního ramene multiatomizátoru. V tomto uspořádání s mírnějším teplotním gradientem byly optimalizovány podmínky prekoncentrace. Účinnost cyklu záchyt – uvolnění se oproti neintegrovanému uspořádání zvýšila z 45 % na 70 %.

Vodík vznikající při generování hydridu způsobuje svou přítomností v nosném plynu neúplný záchyt analytu. Proto byl v kroku záchytu analytu vodík z pasti odstraněn reakcí se stechiometrickým nadbytkem kyslíku. Tím se zlepšila opakovatelnost měření, účinnost cyklu záchyt – uvolnění činila  $(92 \pm 2)$  %. Za těchto podmínek lze navíc provádět celý cyklus při stejné teplotě, uvolnění analytu je dosaženo jen změnou složení plynné fáze. K záchytu analytu dochází v atmosféře obsahující argon a kyslík, k uvolnění dochází uzavřením přívodu kyslíku v atmosféře obsahující argon a vodík.

Tyto poznatky vedly k podstatnému zjednodušení aparatury. Samostatně vyhřívaná past byla odstraněna a záchyt byl prováděn v přívodním rameni běžně dostupného křemenného atomizátoru. V takto upravené aparatuře byla nalezena účinnost prekoncentrace antimonu  $(100 \pm 2)$  %. Byly studovány rušivé vlivy hydridotvorných prvků a rtuti na signál Sb. Přítomnost interferentů v  $10^2 - 10^4$  násobném nadbytku vůči analytu nepůsobí při stanovení rušivě.

Získané poznatky vedly k nové metodě stanovení stopových koncentrací antimonu, která umožňuje po 5 minutové prekoncentraci stanovení vzorků s obsahem řádově v desítkách  $\text{pg}\cdot\text{ml}^{-1}$  Sb. Vyvinutá jednoduchá a citlivá metoda je plně konkurenceschopná ostatním analytickým metodám a její princip byl patentován (*PV-2004-854: Dědina J., Kratzer J.: Způsob prekoncentrace antimonu pro jeho stanovení metodami atomové spektrometrie. Podáno 2. 8. 2004.*). Práce byla realizována v rámci grantového projektu 203/01/0453 GA ČR Rozvoj technik generování a atomizace těkavých sloučenin perspektivních pro stopovou a ultrastopovou prvkovou a speciální analýzu metodami atomové spektrometrie.

### **Stanovení palladia ve vzorku půdy z blízkosti dálnice metodou hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem**

*Ing. Jan Polák*

*Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko technologická, Praha  
(školitel: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.)*

Palladium je často využíváno jako aktivní součást katalyzátorů při hydro- a dehydrogenačních procesech. Celosvětového rozšíření pak dosáhlo používání třicestných katalyzátorů v automobilech. Ačkoliv je palladium chemicky odolné, dochází k jeho emisi do ovzduší a následnému usazování v blízkosti silnic. Dále může palladium vstupovat do metabolismu živých organismů, a proto je důležité sledovat jeho distribuci v přírodě a změny, které zde vyvolává.

Pro stanovení palladia ve vzorcích životního prostředí je nutné používat citlivé metody, mezi které patří hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem. Často však není možné provést přímou analýzu vzorku kvůli existenci závažných interferencí. Cílem předložené studie bylo vyšetření základních nespektrálních a spektrálních interferencí při stanovení palladia a navržení možností jejich eliminace při použití metody externí kalibrace a izotopového zředování. Následovalo ověření metod pomocí analýzy certifikovaného referenčního materiálu. Diskutovány byly též nejistoty jednotlivých stanovení.

## **Kategorie B - publikovaná původní práce nebo soubor prací**

### **Vibrační spektroskopie a počítačové modelování proteinů**

*RNDr. Vladimír Kopecký Jr., PhD., Fyzikální ústav, MFF UK*

Znalost struktury proteinů hraje jednu z nejdůležitějších rolí v současných bio-vědách. Přes nesporné úspěchy rentgenostrukturní analýzy a NMR spektroskopie při odhalování struktury proteinů, stále existují typy proteinů, které odolávají jejich analýze. V souboru předkládaných prací je demonstrováno nově navržené řešení tohoto problému pomocí



spojení teoretického přístupu, reprezentovaného počítačovým modelováním proteinů, a experimentálního, založeného na užití vibrační spektroskopie. Samostatné použití modelování proteinů je často kritizováno pro nedostatečné sepětí s realitou. V současné fázi výzkumu totiž není možné počítat struktury proteinů *ab initio*, ale je třeba užít homologií s již známými strukturami proteinů, což vyžaduje kvalifikovaný a kritický přístup výzkumníka. Tímto přístupem však lze získat řadu výpočetně ekvivalentních 3D modelů. V experimentálním přístupu se oproti tomu metody vibrační spektroskopie, tj. Ramanovy a infračervené spektroskopie, řadí mezi metody nízkého rozlišení proteinové 3D struktury. Jejich výhodou je však rychlost, nenáročnost a v neposlední řadě možnost studia proteinů a jejich interakcí za fyziologických podmínek. Spojením obou výše zmíněných metod lze tudíž jejich jednotlivé nedostatky eliminovat a získat tak poměrně kvalitní představu o interakcích a 3D struktuře studovaných proteinů. Navržená metodika představuje významný posun ve studiu proteinů, skutečné postavení mostů mezi svým přístupem k řešení problému velmi vzdálenými vědeckými disciplínami – fyzikou, chemií a molekulární biologii.

Do soutěže bylo předloženo celkem 6 prací s významným podílem soutěžícího.

### **Hmotnostní spektrometrie v imunologii**

*Petr Man*

*Mikrobiologický ústav AV ČR a katedra biochemie PřF UK*

Do soutěže byly předloženy 3 práce, které dokumentují využití jedinečných vlastností hmotnostní spektrometrie pro výzkum problematik z oblasti imunologie a buněčné biologie.

V první práci byl podrobně mapován proteom membránových mikrodomén (GEMs) přirozených zabijčských buněk. Byla vyvinuta metodika pro izolaci GEMs kompatibilní s následnou hmotnostně spektrometrickou analýzou. Pro identifikaci proteinů přítomných nebo asociujících s GEMs bylo využito spojení dvoudimenzionální mikrokapilární vysokoučinné kapalinové chromatografie s tandemovou hmotnostní spektrometrií. Metodika byla poté úspěšně aplikována na charakterizaci GEMs modelové buněčné linie – potkaních přirozených zabijčských buněk. Výsledky poskytly zajímavé poznatky o proteinovém složení GEMs a tím napomáhají lépe porozumět jejich funkci.

Druhé dvě práce popisují objasňování mechanismu vzniku celiakie – chronického onemocnění střeva. Důraz byl kladen na úlohu makrofágů při rozvoji onemocnění. Hmotnostní spektrometrie zde byla použita pro identifikaci fragmentu z proteinu gliadinu, který onemocnění rozbíhá. Fragment s výrazným stimulačním vlivem na makrofágy byl úspěšně identifikován a byla určena jeho primární sekvence. V dalších krocích pak byl studován vliv tkáňové transglutaminasy na aktivační vlastnosti daného peptidu. S využitím vysoko-

rozlišovacího MS/MS módu byla určena dvě specifická místa modifikovaná transglutaminasou. Výsledky pomohly objasnit mechanismus vzniku celiakie a roli nespecifické imunity v počátečních fázích tohoto onemocnění.

### **Terahertzová spektroskopie v časovém oboru**

*Filip Kadlec*

*Fyzikální ústav AV ČR, Praha*

Terahertzová spektroskopie v časovém oboru je moderní a dynamicky se rozvíjející oblast výzkumu s mnohostranným využitím v základním výzkumu i v aplikacích. Metoda je založena na pulzní generaci širokopásmového spektra terahertzového záření, s jehož pomocí lze studovat především materiálové vlastnosti pevných látek, kapalin a plynů v rovnovážném stavu. Krátkost a vysoká intenzita používaných laserových pulzů však umožňují zkoumat také ultrarychlou dynamiku a nelineární jevy k nimž dochází po ozáření látek. Publikované práce se zabývají několika rozdílnými spektroskopickými aplikacemi postihujícími vlastnosti feroelektrik, polovodičů, polárních roztoků a kovů.

Do soutěže bylo předloženo celkem 10 prací s významným podílem soutěžícího, jejichž obsah byl v rámci prezentace stručně uveden.



### **PŘIPRAVOVANÉ AKCE SPOLEČNOSTI V ROCE 2005**

- Seminář: Návaznost chemických měření a referenční materiály (20. 1. 2005)
- Kurz měření vibračních spekter (24. – 28. 1. 2005)
- Kurz interpretace vibračních spekter (31. 1. – 4. 2. 2005)
- Kurz kvantitativní molekulové spektroskopie (7. – 10. 2. 2005)
- Seminář ICP (2. čtvrtletí 2005)
- Seminář OS instrumentálních radioanalytických metod (2. – 3. čtvrtletí 2005)
- 3. škola HPLC/MS (30. 8. – 4. 9. 2005)
- Konference: IV. Anorganická analýza životního prostředí (19. – 22. 9. 2005)

## 2 THETA

### Analytical standards and equipment

2 THETA ASE, s.r.o., P.S. 103, 737 01 Český Těšín  
T/F: 558 732 122, 224, M: 602 720 747, 602 240 553,  
firemní stránky: [www.2theta.cz](http://www.2theta.cz)

E-mail: [2theta@2theta.cz](mailto:2theta@2theta.cz)

### *P.F. 2005*

*Přejeme Vám hodně štěstí v Novém roce 2005 a těšíme se na setkání s Vámi na našich akcích*

**Zajištění kvality analytických výsledků**, seminář, **30.3.-1.4.**, Komorní Lhotka, Beskydy

Odborný garant Prof. Meloun - Univerzita Pardubice  
Ing. Tichý - ČMI Praha  
Ing. Hamalová - ČIA, o.p.s. Praha

**Hutní analytika 2005**, česko-slovensko-polská konference, **11.-15.4.**, Ustroň, Polsko

Odborný garant Dr. Stankiewicz - IMŻ Gliwice

**Aktuální problematika hygienických laboratoří**, konference, **17.-19.5.**, Pec p. Sněžkou

Odborný garant ZÚ se sídlem v Hradci Králové a ZÚ se sídlem v Pardubicích

**Automatická spektrometrie**, kurz, **6.-10.6.**, Žermanická přehrada, Těšínsko

Odborný garant Prof. Plško - Bratislava  
Ing. Tomášek - VŠB -TU Ostrava

**Mikroelementy 2005**, seminář, **5.-7.9.**, Doksy, Máchovo jezero

Odborný garant Dr. Koplík - VŠCHT Praha  
Dr. Čurdová - Puncovní úřad Praha

**Odběry vzorků**, kurz, **7.-9.9.**, Doksy, Máchovo jezero

Odborný garant Doc. Ventura - Univerzita Pardubice  
Ing. Hamalová - ČIA, o.p.s. Praha

**Analýza organických látek**, kurz, **10.-13.10.**, Komorní Lhotka, Beskydy

Odborný garant Doc. Ventura - Univerzita Pardubice  
Prof. Jandera - Univerzita Pardubice  
Prof. Ševčík - Karlova univerzita Praha

**Referenční materiály a jejich využití**, konference, **7.-9.11.**, hotel Medlov, Českomoravská vrchovina

Odborný garant Ing. Tichý - ČMI Praha  
Ing. Bičovský - Praha  
Ing. Klokočnicková - ČIA, o.p.s. Praha

## NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

Skripta AAS I – základní kurz (2003)	387,- Kč
Inorganic Environmental Analysis	161,- Kč
Referenční materiály (přednášky)	93,- Kč
Skripta AAS II (pro pokročilé) – tč. rozebráno	373,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
Kurz ICP pro pokročilé	120,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
Metodická příručka pro uživatele FTIR spektrometru	100,- Kč
Kurz Spojení HPLC/MS (2001)	300,- Kč
12. Spektroskopická konference: program, abstrakta příspěvků, seznam účastníků	190,- Kč
Souhrn přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA'03	62,- Kč

Objednávky (do vyčerpání zásob) přijímá písemně nebo telefonicky sekretariát Společnosti (pí. Pavla Vampolová, tel. 233 332 343).

---

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

<http://www.spektroskopie.cz>

adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6; tel./fax: 233 332 343

redakční rada:

Dr. Soňa Přádná, CSc., Dr. Milan Fara, CSc., Prof. Dr. Viktor Kanický, DrSc., Ing. Dana Kolihová, CSc.

tech. redakce: Pavla Vampolová

redakční uzávěrka: prosinec 2004; uzávěrka příštího čísla: únor 2005