

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



pragolab

thermo
scientific

Authorized Distributor

NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY

Agilent | Authorized
Distributor

Altium

PTIK
INSTRUMENTS

Generálními sponzory Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci jsou
firma ThermoFisher Scientific spolu s partnery Pragolab s.r.o. a Nicolet CZ s.r.o.,
firma Agilent Technologies Inc. zastoupená autorizovaným distributorem Altium International s.r.o.,
firma Optik Instruments s.r.o., oficiální distributor společnosti BRUKER Optics
v oblasti FTIR a Ramanovy spektrometrie

B U L L E T I N
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARKA MARCI

203

červenec 2025

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz

telefoniční číslo sekretariátu: 722 554 326

38. ročník konference NMR Valtice 2025

R. Fiala, A. Církva

V příjemně jarním květnovém termínu 19. 5. - 21. 5. 2025 se uskutečnil další ročník tradičního středoevropského setkání vědců a pracovníků v oboru nukleární magnetické rezonance (NMR) - odborná konference 38. NMR Valtice 2025. Tuto konferenci

pořádá Středoevropský technologický institut CEITEC Masarykovy univerzity Brno. Letošního ročníku NMR Valtice se zúčastnilo celkem 78 registrovaných účastníků. Největší počet účastníků pocházel z České republiky, kromě nich však do Valtic přijeli i účastníci z Rakouska, Německa, Maďarska, Francie, Polska, Švýcarska a Thajska.

Na konferenci bývají tradičně zastoupena všechna významná pracoviště v ČR, která metodu NMR spektroskopie používají. Z toho plyne i velká diverzita prezentovaných témat. Zástupci NMR komunity tak mají možnost rozšířit si své obzory i o spektra látek, se kterými sami ve své praxi nepracují. Kromě studia organických molekul v roztocích byla hojně zastoupena i spektroskopie v pevné fázi a výpočetní metody pro predikci a interpretaci NMR parametrů. Oproti minulosti naopak ubylo přednášek zabývajících se výzkumem biomolekul, kde vědci své výsledky směřují spíše na setkání strukturních biologů. V programu dostávají prostor i výrobci NMR spektrometrů, příslušenství a chemikálií. V letošním roce se nově v programu objevila prezentace o zkapalňovačích helia, které v důsledku nárůstu ceny kapalného helia nabývají na významu. K navazování a posilování kontaktů a živým diskusím přispívá i společenský program, využívající pohostinnosti vinorodé jižní Moravy.



Účastníci konference 38. NMR Valtice. (foto R. Fiala).

Valtická konference je již tradičně také fórem pro slavnostní předání Ceny Petra Sedmery, kterou Spektroskopická společnost Jana Marca Marci oceňuje nejlepší vědeckou práci z oboru nukleární magnetické rezonance publikovanou v předchozích třech letech autorem působícím v České republice ([Cena Petra Sedmery | Spektroskopická společnost JMM \(spektroskopie.cz\)](#)). Cenu Petra Sedmery pro rok 2025 získala práce kolektivu autorů přihlášená korespondujícím autorem Ondřejem Jurčekem z Farmaceutické fakulty Masarykovy Univerzity “Unsymmetric Chiral Ligands for Large Metallo-Macrocycles: Selectivity of Orientational Self-Sorting“, publikovaná v *Angewandte Chemie Int. Ed.* v roce 2024. (plný text práce je k dispozici on-line v open access módu [zde](https://doi.org/10.1002/anie.202409134) <https://doi.org/10.1002/anie.202409134>). V oceněné práci autoři studovali asymetrické a chirální komplexy žlučových kyselin s paladiem za účelem lepšího poznání a případně napodobení procesů, které probíhají v živé přírodě.



Zástupci SSJMM doc. R. Fiala a prof. V. Kanický a předseda poroty prof. N. Müller předávají Cenu Petra Sedmery za rok 2025 Ing. Ondřejovi Jurčekovi, PhD. (foto M. Durec).

Novinkou letošního roku bylo slavnostní oznámení o udělení Stipendia Vladimíra Sklenáře. Stipendium pro podporu odborného růstu doktorských studentů rozvíjejících svůj výzkum s využitím metody NMR bylo zavedeno Masarykovou univerzitou k uctění památky Vladimíra Sklenáře, významného českého a mezinárodně uznávaného vědce v oboru NMR spektroskopie, který zemřel v roce 2024. Jednorázové stipendium ve výši 100 000 Kč je sponzorováno firmou Měřicí technika Morava. Pro rok 2025 stipendium získala Vladimíra Zlinská, studentka Masarykovy univerzity, pracující ve skupině Lukáše Trantírka v CEITECu na výzkumu nukleových kyselin.



Předání symbolického šeku na Stipendium Vladimíra Sklenáře. Zleva ředitelka NCBR MU prof. M. Wimmerová, zástupce firmy Měřicí technika Morava Mgr. F. Holáň, zástupce CEITEC MU doc. R. Fiala, Mgr. Vladimíra Zlinská (foto M. Durec).

Konference ve Valticích nemá posterovou sekci. Tato tradice dává i studentům příležitost přednест přednášku a pak čelit dotazům a připomínkám z pléna. Pro většinu studentů je to první příležitost

vystoupit před mezinárodní odbornou veřejností. Oproti roku 2024 se počet studentských vystoupení mírně zvýšil z osmi na deset. Nejlepší studentské práci prezentované na konferenci je na závěr udělena Cena Josefa Dadoka. Odborná porota, jako obvykle složená ze zástupce brněnské a zástupce pražské vědy pod vedením Lothara Breckera z Vídeňské univerzity, vyhodnotila jako nejlepší studentský příspěvek přednášku „Possible Applications of Small Four-Bond Coupling Constants in Structural Analysis“, kterou přednesla Jana Pavlišová, magisterská studentka z VŠCHT Praha, pracující na své diplomce na Ústavu organické chemie a biochemie AVČR.



Studentka VŠCHT Praha Jana Pavlišová přebírá Cenu Josefa Dadoka za nejlepší studentský příspěvek od předsedy poroty prof. L. Breckera z Vídeňské univerzity (foto R. Fiala).

Poděkování za úspěšný průběh konference patří i všem firmám, které svými sponzorskými aktivitami přispěly k obohacení celého konferenčního programu. Jejich přízně si velice vážíme a potěšitelná je i skutečnost, že mnohé firmy byly na konferenci přítomny osobně svými firemními zástupci. Naše poděkování tedy patří především generálnímu sponzoru konference – firmě Bruker a jejímu českému zástupci – firmě Měřicí technika Morava. Za podporu konference děkujeme i firmě JEOL a dále pak firmám Amedis, Bluefors, Eurisotop, Merck, Rototec-Spintec, SciTech a Zeochem.

Kurz ICP a Workshop laserové ablace 2025: spojení tradice a moderních trendů v plazmové spektrometrii

Markéta Holá, Tomáš Vaculovič

V týdnu od 26. do 30. května 2025 se v prostorách Univerzitního kampusu Bohunice konal Kurz ICP a Workshop laserové ablace, pořádaný Spektroskopickou společností Jana Marka Marci ve spolupráci s Přírodovědeckou fakultou Masarykovy univerzity. Letošní ročník byl výjimečný nejen svou bohatou historií – připomněli jsme si 30 let od prvního kurzu – ale také rozšířením programu o téma laserové ablaci a spektroskopie laserem buzeného plazmatu (LIBS). Poprvé se tak v rámci jednoho týdne spojil tradiční kurz ICP s workshopem laserové ablaci. Pořádání akce bylo podpořeno 6 firmami (Altium, Analytika, LECO, PE Systems, Pragolab a RMI).

Přednáškový program zahrnoval více než 40 příspěvků od odborníků z akademického i aplikačního prostředí. Nechyběla téma věnovaná základům ICP-OES a ICP-MS, moderním aplikacím v oblasti environmentální analýzy, analýze nanočastic, speciační analýze a využití ICP v archeometrii či teranostice. Výrazná pozornost byla věnována právě metodám laserové ablaci – jak ve spojení s hmotnostní spektrometrií (LA-ICP-MS), tak s LIBS. Účastníci měli možnost seznámit se s možnostmi těchto technik pro analýzu biologických a geologických vzorků, pro studium kulturního dědictví i pro zobrazování distribuce prvků v různých typech vzorků.



V rámci úterního programu proběhla prezentace posterových sdělení, která poskytla prostor pro neformální diskuzi a navázání nových kontaktů. Velmi si ceníme početné účasti studentů, jejichž aktivita a zájem výrazně přispěly k živé atmosféře celého kurzu. Kromě odborného programu byl součástí již tradiční společenský večer – grilování v kampusu, který přispěl k seznámení účastníků a bohaté diskuzi nejen na odborná téma.



Součástí programu byla exkurze do Laboratoře atomové spektrochemie (LAS), kde byla představena instrumentace pro LA-ICP-MS a laboratorní sestava LIBS.

Letošní ročník tak opět potvrdil význam Kurzu ICP a laserové ablaci jako vzdělávací i networkingové platformy pro odborníky v oblasti plazmové spektrometrie.

V letošním roce některí naši členové slaví významná životní jubilea

Jubilantům upřímně blahopřejeme a přejeme pevné zdraví do dalších let

Spektroskopická společnost JMM

Beatus Natalis Tibi Professor Blanka Vlčková!

Prof. Blanka Vlčková, vůdčí osobnost české vibrační spektroskopie, letos v plné síle oslavuje kulaté životní jubileum. Její působení je kromě zahraničních pobytů spjato s Přírodovědeckou fakultou Univerzity Karlovy v Praze. Ukončila zde v roce 1979 s vyznamenáním magisterské studium v oboru chemie se specializací anorganická chemie. V roce 1984 na Katedře anorganické chemie PřF UK obhájila disertační práci a získala titul CSc. Jejím učitelem v oblasti vibrační spektroskopie byl doc. Bohuslav Strauch, zakladatel Ramanovy spektroskopie na PřF UK.

Od roku 1984 působí prof. Vlčková na Katedře fyzikální a makromolekulární chemie (KFMCH) Přírodovědecké fakulty UK, nyní v pozici emeritní profesorky. V oboru fyzikální chemie získala titul docent v r. 1997 a titul profesor v r. 2008. K nejvýznamnějším výsledkům její pedagogické činnosti patří vytvoření nové přednášky Vibrační

spektroskopie v r. 1992 a její systematická výuka až do r. 2024 (s průběžným začleňováním nových poznatků, např. metod s femtosekundovým časovým rozlišením). Dále se profesorka Vlčková po více než 25 let věnovala výuce Obecné chemie, nejprve formou cvičení a od r. 2000 formou přednášek. Úspěšná je rovněž její vědecko-pedagogická práce, konkrétně vedení 9 disertačních, 10 diplomových a 4 bakalářských prací, společné vedení prací v rámci programu *Cotutelle* a úloha konzultanta dvou dizertačních prací na McGill University Montreal, kde působila jako hostující profesorka v letech 1992-93. Díky své odborné erudici a lidské ochotě je opakovaně z řady spektroskopických pracovišť žádána o posudky kvalifikačních prací od bakalářských až po disertační práce. Mnozí její bývalí studenti a doktorandi pokračují ve vědecké práci na různých pracovištích Akademie věd České republiky a vysokých škol (např. Univerzita Karlova, Univerzita Palackého v Olomouci, České vysoké učení technické, Vysoká škola chemicko-

technologická v Praze) a těží ze znalostí a dovedností získaných ve skupině prof. Vlčkové.

Vědeckou práci vykonávala samostatně od r. 1989 ve vlastní, nově vytvořené výzkumné skupině "Povrchem-zesílený Ramanův rozptyl (SERS)", která byla první skupinou v ČR zabývající se mechanismy tohoto jevu. V první polovině 90. let hojně hostovala v zahraničí, a to především na Universiteit van Amsterdam v Holandsku, na McGill University v Montrealu, v Kanadě a na University of Toronto v Kanadě. Zařadila se tak k vůdčím evropským osobnostem v oblasti rozvoje povrchem zesíleného Ramanova rozptylu včetně témat spojených s molekulovou resonancí souvisejících s efektem povrchem zesíleného resonančního Ramanova rozptylu (SERRS). K nejvýznamnějším výsledkům patří objasnění mechanismu tlumení molekulární rezonance v procesu SERRS, přínos k objASNění současného působení elektromagnetického mechanismu SERSu a grafenem-zesíleného Ramanova rozptylu (GERS) a důkaz tvorby redukovaných Ag(0) adsorpčních míst v důsledku chemických modifikací povrchů Ag nanočastic a v průběhu přípravy Ag nanočastic metodou laserové ablaci Ag terče. Od r. 2017 se věnovala rovněž studiu mechanismů plasmonem-zprostředkovaných chemických reakcí. Výsledkem její vědecké práce je 83 původních vědeckých prací dle Web of Science, dále dvě kapitoly v monografiích, plenární a 47 zvaných přednášek na mezinárodních konferencích a zahraničních univerzitách. V r. 2011 získala profesorka Vlčová ocenění "Certificate of Appreciation for Peer Review

Activities" udělený American Chemical Society. Profesorka Blanka Vlčková byla rovněž hlavní řešitelkou 6 projektů GAČR a dvou projektů MŠMT, z toho jednoho projektu mezinárodní spolupráce s USA. V letech 2004-2023 byla koordinátorkou ERASMU na KFMCH.

Profesorka Blanka Vlčková se intenzivně věnuje práci pro Spektroskopickou společnost Jana Marka Marci. Od roku 1993 je nepřetržitě členkou hlavního výboru Společnosti, dlouhodobě vede odbornou skupinu Vibrační spektroskopie a v letech 2011 až 2024 byla předsedkyní odborné sekce Molekulové spektroskopie. Každoročně se podílí na Kurzech vibrační spektroskopie, jejichž tradice je neodlučně spojena se jménem doc. Bohuslava Straucha. Pravidelně se podílí na přípravě a organizaci konferencí pořádaných SSJMM. Její mezinárodní renomé umožňuje úspěšné účasti předních světových molekulových spektroskopiků na akcích Společnosti.

Milá Blanka, přejeme Ti jménem svým i jménem celé Společnosti JMM pevné zdraví, nadále hodně entuziasmu a nadšení pro aktivity Spektroskopické společnosti a zdar spektroskopie jako takové. *Quod bonum, faustum, felix, fortunatumque sit.*

V Praze, Brně, a Hřebčí

Pavel Matějka, Josef Štěpánek, Vladimír Baumruk, Ivan Němec, Ivana Šloufová, Peter Mojzeš, Marek Procházka a Viktor Kanický

Zvyšte své nároky v prvkové analýze

Špičkový ED XRF spektrometr Quant'X
Thermo Scientific nabízí:

- Rychlou a spolehlivou analýzu od <ppm do 100%
- Zobrazení vzorku pomocí CCD kamery
- Nastavitelnou velikost paprsku 1 – 15 mm
- UniQuant FP bezstandardní analýzu
- Výroba a předváděcí pracoviště v Brně



Dokonalost jednoduchých kvadrupólů ve dvou variacích



Jste připraveni posunout hranice Vaší laboratoře díky hmotnostně spektrometrické detekci?

Představujeme Vám novou generaci hmotnostních detektorů **Agilent InfinityLab Pro iQ**. Tyto přístroje nabízejí bezkonkurenční výkon spojený s inteligencí přístroje, která činí analýzy velkých i malých molekul stejně snadnými jako s UV detekcí.

Detektory Agilent InfinityLab Pro iQ Series nabízejí kompletní škálu iontových zdrojů pro optimální výkon. Kromě ionizace elektrosprejem (**ESI**) využitelné pro široké spektrum molekul a chemické ionizace za atmosférického tlaku (**APCI**) pro méně polární sloučeniny, je k dispozici i **Agilent Jet Stream (AJS) pro ultra-vysokou citlivost ESI (s modelem Pro iQ Plus)** a multimód zdroj (**MMI**).



- **Pro iQ:** Ideální pro rutinní detekci s hmotnostním rozsahem m/z 2-1600 a citlivostí lepší než 100 fg.
- **Pro iQ Plus:** Ideální volba pro pokročilou stopovou analýzu a analýzu biomolekul s rozsahem m/z 2-3000 a mimořádnou citlivostí lepší než 25 fg.



Agilent je připraven posunout Vaši laboratoř na další úroveň. A co Vy?

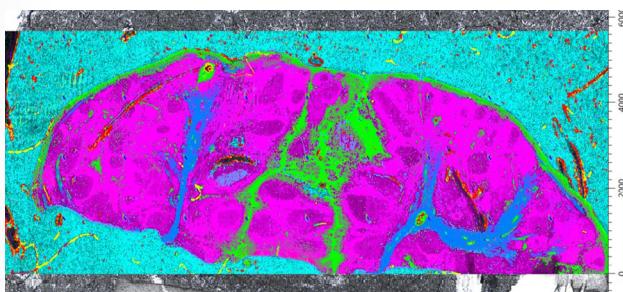
Revoluční technologie v mikroskopii



LUMOS II ILIM

Infračervené zobrazování v reálném čase!

- Extrémní rychlosť chemického zobrazování > 60.000 spekter/s!
- Nejvyšší citlivost a prostorové rozlišení na trhu
- QCL technologie s plošným detektorem
- Automatizovaná IČ analýza částic, tablet a tkání
- Jedna z nejrychlejších technik zobrazování na trhu



RAMANTouch

Nejrychlejší Raman imaging na trhu

- Technologie liniového laseru v kombinaci s konvenčním CCD
- Měření 400 spekter najednou s libovolným integračním časem
- Aplikovatelné i na obtížně měřitelné vzorky
- Extrémně výkonné lasery
- Nejvyšší úroveň automatizovanosti
- Efektivní hloubkové profilování v z-ose

NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2010, sborník přednášek na CD	199,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
5. kurz ICP spektrometrie 2009	350,- Kč
6. kurz ICP spektrometrie 2011	350,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
12. Spektroskopická konference	190,- Kč
13. Spektroskopická konference (2007 Lednice)	130,- Kč
AAS II – kurz pro pokročilé (2006)	435,- Kč
Atomová absorpční spektrometrie - Kurz AAS I (2015) – kovová kroužková vazba	590,- Kč
Atomová absorpční spektrometrie - Kurz AAS II (2019) – kovová kroužková vazba	590,- Kč
Atomová absorpční spektrometrie - Kurz AAS II (2019) – vazba V2	690,- Kč

Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

se sídlem: Ke Karlovu 2027/3, 120 00 Praha 2 - Nové Město 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 C14

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

Telefon: 549 49 1436, mobil: 722 554 326, tajemník Tomáš Vašina

redakční rada:

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

prof. Ing. Josef Časlavský, CSc., prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc.

tech. redakce: Mgr. Rostislav Červenka, Ph.D.

redakční uzávěrka: 15. 6. 2025

uzávěrka příštího čísla: 10. 10. 2025