



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



spektroskopická společnost
Jana Marcia Marci 344
166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

BULLETIN

SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
Jana Marcia Marci

Číslo 69

srpen 1993

DR. VLADIMÍR HANUŠ SEDMDESÁTNÍKEM
(* 5.6.1923)

Na přírodě jsou krásné zákony, řád jejího dění a nakonec někdy i ty výjimky, kterými si dovoluje vybočovat z průměrnosti. Je třeba známo, že nám v pokročilejším věku rychle ubývá buněk šedé kůry mozkové, ochabuje paměť, snižuje se tvůrčí výkonnost. A tak po šedesátce dříve nebo později, chtě nebo nechťé, přecházíme na vedlejší pracovní režim a věnujeme se více zahrádě nebo tomu, na co v aktivnější části života nezbýval čas. Vzácně se lze ale setkat s lidmi, jimž pracovní elán a profesionální výkonnost vydrží až do sedmdesátky. Jednou z takových výjimečných osobnosti je Dr. Vladimír Hanuš. V jeho postavení, kdy i podle těch nepřísnějších kriterií již bohatě splnil a překonal normy společenské užitečnosti, by jiní vědci již dávno rezignovali na to napravovat vrtochy kdysi moderního, ale dnes již stárnoucího hmotnostního spektrometru pro analýzu organických látek. Vladimír jako by si předsevzal, že nejen on sám, ale i jeho přístroj musí vydržet co nejdéle. A tak jako dávný Mistr Hanuš (nikoliv ovšem oslepěný a roztrpčený, ale naopak osvícený a plný elánu) vždy najde způsob, jak "sáhnout do stroje" a přivést jej opět k životu. Jeho vůli, pracovitosti i vědeckému rozhledu vděčíme u nás za rozvoj hmotnostní spektrometrie organických látek. V jeho osobě se spojily ve zvlášt příhodné kombinaci bohaté zkušenosti hmotnostního spektrometristy (nezapomínejme, že Vladimír je nestorem tohoto oboru u nás) a široký rozhled a znalosti organické chemie. Přidejte k tomu přirozenou zvidavost a zálibu v luštění záhad struktur nejrůznějších organických látek a umocněte to vysokým koeficientem etické zodpovědnosti, skromnosti a někdy až přeháněné snahy pomáhat a máte obraz Vladimíra Hanuše. Dlouhý by byl seznam pracovišť (domácích i zahraničních), kterým kdy Vladimír svými analýzami prokázal služby. Reputaci, kterou si Dr. Hanuš takto vybudoval, dobře charakterizuje výrok jednoho kolegy (P.S.) z MBÚ, který, když mu z hmotnostního spektra předpovíděl správnou strukturu naprostě neočekávaného vedlejšího produktu, prohlásil: "Musím si koupit klobouk, abych mohl před Vláďou smeknout".

Dr. Vladimír Hanuš nejenže odvedl (a stále ještě odvádí) úctyhodný objem vědecké práce, ale obstál i ve velmi obtížné vedoucí roli v Ústavu fyzikální chemie ČSAV v době po odchodu Prof. Brdičky. Za to vše se Dr. Hanušovi dostalo mnohých poct, mimo jiné i čestné členství (1988) a plaketa Spektroskopické společnosti (1984). Největší uspokojení však Vladimírovi přináší vědomí, že někomu přinesl užitečnou pomoc. Za to mu všichni přátelé a spolupracovníci při této příležitosti přicházejí znova poděkovat, v úctě smeknout a počítat pevné zdraví a sílu k řešení dalších zajímavých problémů a záhad.

Cestmír Jech a Karel Mach
(upraveno pro Bulletin se svolením autorů)

KURZ ATOMOVÉ ABSORPCNÍ SPEKTROMETRIE

Kurz, který byl určen začínajícím a mírně pokročilým pracovníkům, se konal ve dnech 25. - 27. května 1993. Jeho pořádání má již svou tradici, stále se však schází dost zájemců jak z řad nových majitelů přístrojů, tak i těch, kteří byli postaveni před novou problematikou a začínají s novou metodou.

Náplní kurzu byly přednášky jak teoretické, tak i s praktickým zaměřením a následující diskuse obvykle zabrala i větší část přestávky, kterých však v programu nebylo mnoho. Délka kurzu byla proti minulým létům zkrácena na 3 dny, což však bylo řadou posluchačů hodnoceno spíše nepříznivě, protože 7 hodin přednášek denně znamenalo "zahlcení" přemírou informací pro většinu z nich. Chyběly i delší večerní diskuse, které byly v minulých kurzech, pořádaných internátní formou, velice hojně. Jako organizátoři jsme však byli vedeni snahou o co nejekonomičtější průběh, který by vhodnou výši poplatků i krátkostí trvání byl přijatelný pro větší počet zájemců.

Úroveň kurzu i množství předaných dlouholetých zkušeností účastníci velmi vysoce ocenili v závěrečné diskusi. V anketě na konci kurzu účastníci vypsali zájmové okruhy, které by měly být zařazeny do plánovaného kurzu pro pokročilé, do něhož se hlásí již více než 100 zájemců.

Bude-li možné sehnat ubytování s vyhovující místností pro přednášky, bude další kurz pořádán opět tradičně internátním způsobem. V tomto směru spoléháme i na pomoc členů Spektroskopické společnosti JMM.

Dana Kolihová

XXVIII.COLLOQUIUM SPECTROSCOPICUM INTERNATIONALE

Místem konání XXVIII.C.S.I. byl ve dnech 29.6.-4.7.1993 areál University of York ve Velké Británii. Celá universita je situována vně hradeb starobylého Yorku v rozsáhlém parku s jezírkem, v jehož zátočinách hnizdí spousta vodního ptactva. Rozsáhlý komplex zahrnuje několik kolejí s přednáškovými sály, pavilony pro výuku fyziky, chemie, výpočetní techniky aj. dále pak knihovnu, sportovní areál a moderně pojatou ústřední budovu se sálem, který pojme více než 600 posluchačů. Pouze administrativní budova je z alžbětínské doby, přestavěná v 19. století. Provoz university byl slavnostně zahájen královou v r. 1963, avšak některé koleje a budovy jsou ještě novější.

Všech 515 účastníků bylo ubytováno v kolejích universitního areálu v jednolůžkových pokojích (jiné tam zřejmě ani nejsou) a v jídelnách kolejí byla zajištěna i strava s výběrem z několika jídel v neomezeném množství.

Společenský program byl snad poprvé v historii C.S.I. určen všem delegátům, neboť byl z velké části sponzorován vystavujícími firmami a tudíž bez jakýchkoli poplatků od účastníků konference, včetně polodenního výletu do několika atraktivních míst kraje York, což jsme náležitě ocenili.

Vlastní odborný program jednotlivých dnů zahajovala vždy plenární přednáška, po níž se jednání dělilo do několika sekcí. Nejpočetněji byla počtem účastníků, orálních přednášek i posterů zastoupena atomová sekce. Do samostatné sekce přednášek i posterů bylo zařazeno spojení hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem, což je technika vyznačující se kromě vysoké citlivosti i tak vysokou cenou, že se v České republice nevyskytuje, třebaže má již své místo v řadě laboratoří všech kontinentů.

Novou cestu pro analytické využití atomové spektrometrie otevírá použití polovodičových diodových laserů, které jsou malé, po-

měrně levné a snadno se s nimi pracuje. Možnost rychlé změny vlnové délky umožňuje korekci pozadí i pro velmi rychlé přechodné signály z elektrotermických atomizátorů. Nepatrné rozměry diody dávají možnost sestavit zařízení s řadou laserových diod pro simultánní viceprvkovou atomovou absorpcní spektroskopii bez nutnosti použití disperzního systému (monochromátoru). V současné době je možno touto technikou stanovit asi 50 prvků. Další možnosti je laserem indukovaná atomová fluorescence, opět dovolující simultánní viceprvkové měření. Protože cena jedné laserové diody by měla být asi 150-170 liber, byly by tyto přístroje dostupné pro řadu laboratoří. Dosahované meze detekce jsou velmi slabné, pro řadu prvků srovnatelné s AAS s elektrotermickou atomizací a lze stanovit i typické nekovy, jako O, H, N a halogeny.

Na XXVIII. C.S.I. byla nejpočetnější skupina příspěvků prezentována ve formě posterů, z nichž byl každý den vyhodnocen jeden jako nejlepší. Tři vítězné postery byly vyhlášeny na závěrečném slavnostním shromázdění v Národním muzeu železniční dopravy v Yorku. Byla jsem nesmírně šťastná, když za poslední den byl jako nejlepší vyhlášen poster "Determination of Chemical Forms of Mercury in Human Hair by Atomic Absorption Spectrometry" autorů Kolihoval, Kratzer, Spěváčková, Žilková.

V programu C.S.I. byla i schůze národních delegátů, kde Českou republiku zastupovala V. Spěváčková. Rozhodovalo se o místě pořádání jubilejního XXX. C.S.I. mezi USA a Austrálií, neboť Rakousko nepotvrdilo svůj zájem o jeho konání (a dokonce se ani včas nepřihlásil jeho delegát). Hlasováním v poměru 17 : 15 zvítězila Austrálie, kde se C.S.I. dosud nikdy nekonalo.

Poměrně rozsáhlá byla i diskuse na otevřeném setkání, které se zabývalo možnostmi spolupráce mezi evropskými spektroskopiky. Za Spektroskopickou společnost JMM se jednání zúčastnily V. Spěváčková a D. Kolihoval s návrhem na vytvoření seznamu adres existujících společností, shromažďujících spektroskopiku v jednotlivých zemích. Setkání se zúčastnili i kolegové z Kanady, USA a Austrálie, kteří se přimlouvali za rozšíření této spolupráce i na země mimoevropské.

Výstavy přístrojů se zúčastnilo asi 40 firem a pokud mohu povídám, tak alespoň v atomové spektroskopii se svými opravdu nejnovějšími přístroji. Odbornou literaturu vystavovala 4 vydavatelství, v prvních dnech byla volně k dispozici i některá čísla časopisů. Ve zvláštních číslech Analystu a JAASu by měly vyjít příspěvky z C.S.I.

Co dodat na závěr? Snad jen to, že z České republiky bylo v Yorku 6 účastníků, že se nám (a nejenom nám) velmi líbilo celkové pojetí, že jak odborný tak společenský program byl na velmi dobré úrovni, (což bylo patrně dáno i tím, že počet účastníků nebyl přehnaný) a že naše odborné vystoupení bylo úspěšné, takže máme proč být se svou účastí na XXVIII. C.S.I. spokojeni.

Dana Kolihoval

Upozorňujeme zájemce

o 8. seminář Komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí

kterí ještě neodeslali závaznou přihlášku, aby tak učinili co nejdříve.

Kapacita ubytování je omezena.

Ve dnech 9. - 13.května se v italském Rimini konal 3.pracovní seminář (workshop) s názvem Modern developments and applications in microbeam analysis. Seminář byl pořádán společností EMAS (European Microbeam Analysis Society). Program semináře se skládal z pozvaných přednášek na vybraná téma a z posterové sekce.

Hlavními tématy byly : Korekční metody v kvantitativní rtg.mikroanalýze elektronovým svazkem. Automatizace, přesnost a správnost analýz. Spektroskopie energetických ztrát elektronů (EELS). Augerova mikroanalýza. SIMS kvantitativní analýza iontovými svazky. Jednotlivé bloky přednášek byly doplněny diskusemi, jejichž náplň byla vybrána podle převládajícího zájmu posluchačů. Seminář byl doprovázen výstavou přístrojů zainteresovaných firem.

Semináře se zúčastnilo asi 150 pracovníků z oboru. Tento počet byl velmi příznivý jak pro vytváření osobních kontaktů a projednávání specifických problémů tak i pro celkovou přátelskou atmosféru. Z České republiky bylo 7 účastníků, všichni přispěli nejméně jedním posterem. Účast některých byla podpořena EMASem. Příští seminář se plánuje na r. 1995 ve Francii.

Karel Jurek

Nakladatelství Informatorium, Kouřimská 11, 130 00 Praha 3
přijímá objednávky na knihu :

Greenwood N.N., Earnshaw A. : Chemie prvků

Kniha vyjde v říjnu 1993.

Rozsah asi 1 600 stran, více než 1 200 obrázků, grafů a vzorců.

ZPRÁVA Z 55.SCHÚZE HLAVNÍHO VÝBORU

Byla vyhodnocena soutěž mladých spektroskopiků: I. místo získal Ing.J. Šarapatka, II.místo Mgr.K.Cermáková.

Ing.Streško podal zprávu o zřízení Slovenské spektroskopické společnosti a navrhl, aby na schůzích hlavního výboru byl vždy jeden zástupce druhé společnosti, aby mohl být koordinován plán odborných akcí.

Zprávu o činnosti předsednictva přednesla Ing.Spěváčková a uvedla, že hlavním bodem jednání v uplynulém období bylo vyřešení problémů spojených s rozdelením Společnosti. Majetek Společnosti byl rozdělen podle poměru členů za posledních 5 let.

Zpráva o činnosti sekcí : Sekce atomové spektroskopie uspořádala 12.seminář AAS a základní kurz AAS, na který bude v příštím roce navazovat pokračovací kurz.

Sekce molekulové spektroskopie uspořádala Kurz měření vibračních spekter a Kurz interpretace vibračních spekter.

Odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie uspořádala 9.NMR seminář. Součástí programu byl seminář o magnetické tomografii. Zástupci firem informovali o svých novinkách, firma Bruker předváděla programy na analýzu NMR spekter. Účastníci semináře se dohodli, že v r. 1994 se budou pořádat 10.NMR Valtice u přiležitosti 20.výročí vzniku odborné skupiny.

Sekce speciálních spektroskopických metod uspořádala seminář "Novinky v rtg.spektrometrii".

ZPRÁVA Z VOLEBNÍHO VALNÉHO SHROMÁŽDĚNÍ

Doc.Volka zhodnotil práci hlavního výboru za uplynulé období a uvedl mj. některé potíže, s kterými se činnost Společnosti v současné době setkává. Shrnuhl hlavní etapy rozdělení Čs.spektroskopické společnosti. Společnost jako občanské sdružení je nyní nezávislá na orgánech státní správy vyjma příslušného obecního úřadu a svoji činnost bude hradit z příspěvku členů a výnosu akcí.

Ing.Količová podala zprávu o hospodaření Společnosti a předložila ke schválení návrh na převedení části majetku společnosti na vkladový certifikát. Zpráva i návrh byly valným shromážděním schváleny.

Do hlavního výboru byli zvoleni :

předseda :	Doc.Ing.Karel Volka, CSc
I.místopředseda :	Dr.Zdeněk Slovák, CSc
II.místopředseda :	Ing.Miloslav Vobecký, CSc
vědecký tajemník :	Dr.Miroslav Ryska, CSc
hospodář :	Ing.Dana Količová, CSc
organizační tajemník :	Ing.Věra Spěváčková, CSc
revizor :	Dr.Petr Pracna, CSc
	Dr.Jiřina Korečková, CSc
	Dr.Zdeněk Slovák, CSc
předseda atomové sekce :	Dr.Štěpán Urban, CSc

předseda molekulové sekce :	Doc.Ing.Václav Hulinský, CSc
předseda sekce speciálních spektroskopických metod :	Ing.Ivan Obrusník, DrSc
ref.pro zahraniční styky :	Ing.Jiří Doležal, CSc
přístrojová komise :	Dr.Ivan Rubeška, CSc
názvoslovná komise :	Doc.Ludmila Čermáková, CSc
školská komise :	
komise referenčních materiálů :	Ing.Jan Kučera, CSc
komise pro životní prostředí :	Ing.Tomáš Černohorský, CSc

redakce Bulletinu :	Dr.Miroslav Ryska, CSc
	Dr.Zdeněk Zelinger
	Dr.Milan Fara, CSc
	Doc.Marie Gricová, CSc
	Dr.Karel Jurek, CSc
	Dr.Jiřina Korečková, CSc

Volba do jednotlivých funkcí byla provedena na zasedání nového hlavního výboru dne 1.7.1993.

PŘIPRAVOVANÉ AKCE

13. - 17.9.1993 Praha
Nuclear Analytical Methods in the Life Sciences

22. - 24.září 1993 Chlum u Třeboně
Secondary Electrons in Electron Spectroscopy, Microscopy nad microanalysis

19. - 20.10.1993 Brno
Seminář o rozkladu vzorků

15. - 20.listopadu 1993 Liblice
8.seminář Komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí

Informace
o připravovaných akcích získáte v sekretariátě společnosti

SOUTĚŽ MLADÝCH SPEKTROSKOPIKŮ

PES Study of Pd and Pb Deposits on Si and SiO₂/Si Supports

T. J. Šarapatka

By using the photoelectron spectroscopy (PES) method, metal (M=Pd,Pb) induced transfers of positive (with Pb) or negative (with Pd) charge from Si to M/SiO₂ layers have been studied together with an effect of additional sample irradiation by visible light. The Si 2p reference binding energies, which reflect the flattening of the bands, and the values of the Si band bending have been determined in dependence on the amount of the metal deposited. After inserting the 1.5 nm thick SiO₂ interlayer, the magnitude of photo-response with the Pb/Si non-reactive interference remains unchanged, whereas this value increases at Pd/SiO₂/Si, compared to that found with the reactive Pd/Si interference. Adsorption of O₂, which increases the photo-response of the Pd/SiO₂/Si sample, leads to the formation of the SiO_x overlayer on the top of Pd/Si without any influence on the original sample sensitivity to visible light.

Studium syntetických polypeptidů a jejich komplexů s porfyrinem metodou povrchem zesíleného Ramanova rozptylu

K. Čermáková

V práci byly studovány polypeptidy, obsahující lysin (Lys-Ala, Lys-Ala-Ala, Lys-Ala-Ala-Ala, Lys-Gly-Gly, Lys-Leu-Ala, stupeň polymerace cca 30 a polylysin) a jejich komplexy s 5,10, 15,20-tetrakis(4-karbonylfenyl) porfyrinem (TPPC4), metodou spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS-spektroskopie) v systému s Ag koloidem. Tyto komplexy vznikají ve vodném prostředí spontánně díky interakci protonizovaných NH₃⁺ skupin lysinů s -COO⁻ skupinami TPPC4.

Studium SERS spekter polypeptidů ukázalo, že v závislosti na potenciálu koloidu dochází 1. k adsorpce polypeptidu na jeho povrch prostřednictvím postranních řetězců polypeptidu nebo vázaných molekul vody, nebo 2. k adsorpce prostřednictvím základního řetězce. Porfyrin se na povrch Ag koloidu přímo adsorbuje pouze za současně metalace, tj. za vzniku Ag(II)TPPC4 povrchového komplexu.

Interakce porfyrinu s polypeptidem byla studována v systémech : 1. s polypeptidem jako prvotním adsorbátem, 2. s porfyrinem jako prvotním adsorbátem a 3. v systému, kde byl adsorbátem předem připravený komplex. Systém Ag koloid/polypeptid/TPPC4 poskytuje kvalitní SERS spektrum porfyrinu volné báze, což dokazuje, že adsorbovaný polypeptid je schopen interakce s porfyrinem, a navíc, že je pro porfyrin molekulárním spacerem, tj. zabraňuje jeho přímé interakci s povrchem, která vede k metalaci a vytvoření povrchového komplexu Ag(II)TPPC4. Po přidání polypeptidu do systému, kde je prvním adsorbátem chemisorbovaný porfyrin Ag(II)TPPC4, došlo k demetalaci porfyrinu a jeho desorpci z povrchu koloidu, způsobené interakcí porfyrin-polypeptid.

V případě adsorpce komplexu SERS spektra prokázala, že se komplex adsorbuje na povrch koloidu jako celek : 1. ve spektru se vyskytují pásy jak porfyrinu, tak polypeptidu, a 2. porfyrin je ve formě volné báze, což je jednoznačným důkazem jeho interakce s polypeptidem.

Práce prokazuje, že SERS-spektroskopie poskytuje unikátní možnost studia vzájemné interakce biomolekul.

ZÁJEMCI O KOUPI A PRODEJ POUŽITÝCH PŘÍSTROJŮ

Nabídky a poptávky zasílejte na adresu Společnosti, telefon/FAX (02) 3112343

SEVEROČESKÉ CHEMICKÉ ZÁVODY s.p., 410 17 Lovosice

Ing. Ivan Galia, analytický servis nabízí k odprodeji AA spektrometr ATOMSPEK H 1581 (Rank-Hilger) rok výroby 1978. Přístroj je plně provozuschopný. Dále nabízíme náhradní díly k přístroji - hořáky pro plamen vzduch - acetylén a vodík, acetylen - oxid dusný, ventily, spinače rozprašovač, hadičky aj., řadu HC lamp : Nd, Eu, Sm, Y, Pb, D od fy Hilger, Fe, Mn, Cu, Cd od fy Zeiss. Přepokládaná cena přístroje včetně ND a HC lamp je 50 tisíc Kč.

ŠKODA, výzkum, Plzeň, s.r.o.

Ing. Jaroslav Čechura telefon 019/ 215 2415 nabízí k odprodeji příp. pronájmu zdroj stabilizovaný NN SS, BP 2420 mlýnek laboratorní MV7 myčka laboratorního nádobí MIELE 619 PH-metr číslicový OP 213 termostat biologický BT 120 PH-metr-aquacheck OH 503 etalpiograf Typ 2 spektrofotometr AAS Philips PU 9400 X vrtačka lab. - argon.atm. 7121 přístroj prosévací autom. AP2C sušárna vakuová SPT 200 váhy anal. jednomiskové VVA 33 váha analytická LB 1050/1 sterilizátor horkovzdušný HS 201A/1 stabilizátor napětí ST AUT 350 počítač osobní PP01

Spektroskopická společnost Jana Marca Marci
adresa sekretariátu : 166 29 Praha 6, Thákurova 7
Redakční rada : RNDr. Milan Fara, CSc, Doc. Marie Gricová, CSc
RNDr. Karel Jurek, CSc, RNDr. Jiřina Korečková, CSc
Technická redakce : P. Vampolová. Redakční uzávěrka : červenec 1993
Pouze pro vnitřní potřebu.