



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI

\*\*\*\*\*

Spektroskopická společnost

Jana Marca Marci

166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

## BULLETIN

SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI  
Jana Marca Marci

Číslo 73

březen 1994

Diskussionstagung und Workshop  
INTERPRETATION VON INFRAROT- UND RAMANSPEKTREN  
Drážďany, 14. - 16. března 1994

Ve dnech 14. až 16. března 1994 se konaly na Technické univerzitě v Drážďanech diskusní dny na téma "Interpretace infračervených a Ramanových spekter". Díky pozvání pořadatelů (Institut für Analytische Chemie der TU Dresden, Deutscher Arbeitskreis für Angewandte Spektroskopie - DASp GDCh) nabyly "diskusní dny" charakter "středoevropské konference" (vedle cca 100 účastníků z celého Německa, 2 účastníci z Francie, 2 z Maďarska, 3 z Chorvatska, po 1 z Holandska, Polska, Slovenska, Finska, Ruska a Slovinska a dále 6 z České republiky. Během třech dnů bylo předneseno 23 přednášek v 5 tematických okruzích (1/ korelace spekter a strukturních parametrů, 2/ tvorba, kvalita a aplikace databází, 3/ simulace spekter, 4/ databáze ve výuce a 5/ expertní systémy pro interpretaci spekter) a bylo prezentováno 39 obdobně zaměřených posterů. Z většiny příspěvků byla zřejmá převaha FTIR techniky. Lze též zaznamenat rozvoj NIR spektroskopie a renesanci Ramanovy spektroskopie (především v souvislosti s FT Ramanovou spektroskopií).

Jednoznačným trendem je "automatizace" strukturní analýzy a maximálním využitím výpočetní techniky včetně počítačových sítí (mezinárodní, národní a "in house" databáze, expertní systémy a simulační programy). Přesto však ze všech diskusí vyplynulo, že sebelepší "umělá inteligence" a expertní systémy (programy) nenahradí inteligenci a zkušenosti experta (člověka). Nicméně jsou tyto systémy vítanou pomůckou pro experty a lze je velmi dobře využít v kurzech a praktikách pro studenty chemie, a to v různé pokročilé formě od bakalářského studia až po doktorandské. Problémem, který byl v rámci závěrečného "workshopu" až překvapivě široce diskutován, je překonání bariéry vůči výpočetní technice, která se stále projevuje u studentů chemie. V tomto smyslu bylo komentováno zaměření "počítačové výuky" na praktické zvládnutí chemicky orientovaného softwaru, využití informačních sítí a provádění rešerší.

Na konferenci představilo několik firem nové přístrojové a především softwarové produkty : Analytik Jena (FTIR a FT Raman spektrometry firmy Nicolet, informační systémy - LIMS), Bruker (FTIR spektrometry, expertní systémy pro interpretaci spekter), Dilor (Ramanovy spektrometry, konfokální Ramanův mikroskop), IRTAINS (výukový software pro strukturní analýzu), Chemical Concepts (databáze a software pro interpretaci spekter), Molecular Design (software pro strukturní analýzu).

Na závěr je třeba zdůraznit, že diskusní dny probíhaly ve velmi příjemné atmosféře vzhledem k perfektnímu odbornému a organizačnímu zajištění, za což patří poděkování především Prof. Dr. R. Salzerovi (Institut für Analytische Chemie der TU Dresden).

Pavel Matějka  
Ústav analytické chemie VŠCHT Praha

#### Zpráva o semináři ANALÝZA ORGANICKÝCH LÁTEK V ŽIVOTNÍM PROSTŘEDÍ

Seminář byl organizován Spektroskopickou společností Jana Marca Marci a společností 2 THETA. Seminář se uskutečnil 7. - 10. března 1994 v Řece v hotelu Javor. Odbornými garanty celé akce byli Prof. Ing. Jaroslav Churáček, DrSc., Vysoká škola chemicko-technologická v Pardubicích a RNDr. Miroslav Ryska, CSc., Výzkumný ústav farmacie a biochemie, Praha. Po organizační stránce byl seminář zabezpečen společností 2 THETA na vysoké profesionální úrovni. Seminář byl zahájen v centrálních analytických laboratořích VŠB Ostrava. Po prohlídce laboratoří, mimochodem vybavených nejmodernější instrumentální technikou, byl zahájen vlastní odborný program semináře.

Po úvodním slovu prof. Churáčka následoval odborný program. Odeznělo 20 přednášek a zhruba 10 informačních sdělení zástupců firem, které se semináře zúčastnily. Součástí semináře byla i výstava přístrojové techniky spolu s ukázkami jejího praktického využití. Této části semináře se účastnilo 12 vystavovatelů, přičemž soubor vystavovaných přístrojů zahrnoval širokou oblast analytiky životního prostředí.

Z přednesených referátů byly nejvýznamnější referát dr. Rysky věnovaný různým technikám hmotnostní spektrometrie a jejich využití v analytice životního prostředí, dále to byly přednášky doc. Melouna, doc. Hajšlové a dr. Pokorného, které byly věnovány využití statistických metod při zpracování analytických výsledků a jejich významu pro hodnocení správnosti a spolehlivosti analytických výsledků.

Ostatní přednášející měli referáty řešící konkrétní problematiku a prezentaci získaných analytických výsledků. Dvě přednášky Ing. Ventury a Ing. Morávkové byly zaměřeny na metodiku získávání výsledků spíše než na prezentaci analytických dat.

Ke všem referátům byla poměrně živá diskuse, a to jak k metodice, tak i k prezentaci dosažených výsledků. V řadě případů diskuse pokračovala i mimo přednáškovou síň zvláště u referátů, které se zabývaly přípravou vhodných standardů a technikou odběru vzorků.

Krátká sdělení zástupců firem byla na dobré technické úrovni a informovala účastníky o novinkách v přístrojové technice.

Dr. Vladislav Kubelka, CSc.  
VŠCHT Praha

#### INFORMACE O 7. KONFERENCI ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE Pardubice, 30. 8. - 2. 9. 1994

Upozorňujeme, že v rámci konference se budou konat tři tematicky zaměřená zasedání uvedená níže :

"Reference materials and quality assurance"  
(referenční materiály a zabezpečování jakosti)  
zasedání organizované komisí pro referenční materiály Spektroskopické společnosti JMM  
odpovědný za program Ing. J. Kučera, Český ekologický ústav, laboratoř NAA, 250 68 Řež u Prahy

"Atomic spectrometry in environmental analysis"  
(atomová spektrometrie v environmentální analytice)  
odpovědný za program Ing. T. Černohorský, Universita Pardubice, katedra ochrany životního prostředí, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice

"Generation of volatile compounds in atomic spectrometry"  
(tvorba těkavých sloučenin pro atomovou spektrometrii)  
mikrosymposium sponzorované firmou Perkin-Elmer,  
odpovědný za program Dr. J. Dědina, Ústav analytické chemie AV ČR, laboratoř analytiky stopových prvků, Vídeňska 1083, 142 00 Praha 4.

Zájemci o účast na konferenci se mohou přihlásit na adresu sekretariátu Společnosti písemně nebo telefonicky či faxem na č. 02-311 23 43 s uvedením názvu případné přednášky nebo posteru.

Na zasedáních organizovaných komisemi jsou vítány i práce aplikačního rázu přednesené v češtině.

#### PŘIPRAVOVANÉ KONFERENCE

DART' 94

Data Handling, Automation, Regulation and Technology  
Conference and Table-Top Exhibition  
24. - 25.10.1994

Hotel Okura, Amsterdam

informace : Zena Barrick

Conference Manager, DART' 94 Conference & Exhibition  
Advanster House, Park West  
Sealand Road  
Chester CH1 4RN  
United Kingdom

tel. 0044-244 378 888

fax 0044-244 370 011

#### ZÁJEMCI O KOUPI A PRODEJ POUŽITÝCH PŘÍSTROJŮ

Nabídky a poptávky zasílejte na adresu Společnosti  
telefon/fax (02)311234

GEMATRIX

spol.s.r.o., 252 28 Černošice, Dr.Janského 953  
Telefon 02-6434154, 6434880

Prodá laboratorní zařízení a materiál :

1. Optický emisní spektrometr PGS-2 s příslušenstvím a náhradními díly
2. Spektrální desky WU-1 9x24cm, WU-2 6x24cm, UV-1 9x24cm a WO-1 6x24cm. Cena 1 krabice 100 Kč.
3. Spektrální elektrody SU 101, SU 202, 205, SU 302, 305, 306, 307, 326 a SU 343. Cena 1 krabice (150 ks) 300 Kč.
4. Vývojky a ustalovače pro fotolaboratoř.
5. Starší sušárny 1201, 2001 a 4001.
6. Fotometr SPEKOL typ 221.

7. Mineralizátor APION.
8. Spektrofotometr UV/VIS Hitachi 200.
9. Zařízení na zdrobňování horninových vzorků (čelistový drtič, síťovací zařízení, laboratorní mlýnek, atp.)
10. Odstředivka K 70.
11. Mikroskop Laboval-2 C.Zeiss Jena.
12. Vodní lázně tří- a čtyřmístné.
13. Analytické váhy Sartorius a anal.váhy polské.
14. Filtrační nálevky průměr 105mm, kádinky, pipety, dávkovače (špačky), děličky 250ml a další menší zařízení.
15. Odměrné válce 1 litr a 2 litry.
16. Buchnerovy nálevky větší, exikátory.
17. Železné kelímky.
18. Kyselina octová, fluorovodíková, sírová, chloristá.
19. Citronan sodný, soda, Eschkova směs, peroxid sodný,  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ,  $\text{NaF}$ ,  $\text{CuSO}_4$ , síran sodný, octan sodný, fosforečnan amonný, isoamylalkohol, Kolodium.
20. Metaboritan lithný ( $\text{LiBO}_2$ ), Spectromelt A12 (směs  $\text{LiBO}_2$  a  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ ), fluorid sodný (vše Merck).
21. Těžké kapaliny - tetrabrometan, bromoform.
22. Teflon - válce průměr 60mm, délka 100mm.

SKLÁRSKÝ ÚSTAV S.P.

Státní zkušebna č. 237

Ing.Vítězslav Křestan, CSc, 500 10 Hradec Králové, Škroupova 957

tel. 049 - 673 356

fax 049 - 619 391

Prodá následující přístroje a doplňky :

1. Spektrograf Q-24 včetně generátoru ABR 3 a Spektroprojektoru SP-2  
Stav : funkční  
Předběžná cena : 35 000 Kč
2. Spektrální lampa s dutou katodou Perkin-Elmer pro platinu  
Stav : funkční  
Předběžná cena : 2 500 Kč
3. Tlakové lahve pro argon, objem 50 l v počtu 5 ks  
Stav : funkční  
Předběžná cena : 4 500 Kč/ks
4. Tlakové lahve pro oxid dusný, objem 10 l v počtu 2 ks  
Stav : funkční  
Předběžná cena : 800 Kč/ks
5. Boxy s nekovovými částmi pro práci se silně korozivními médii,

např. HF, HClO<sub>4</sub>, HNO<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> v počtu 3 ks

Stav : funkční

Předběžná cena : 6 000 Kč/ks

6. Rentgenový difraktometr DRON 2.2

Stav : na náhradní díly

Cena dle dohody

ORGES

120 00 Praha 2, Perucká 13

Koupí jedno nebo dvoupaprskový infračervený spektrometr

Volejte na telefon č. 4729837 nebo 460296 linka 1212

Ing.Vařák nebo Ing.Neumann

- - - - -

ECOICHEM analytické sdružení

182 00 Praha 8, Dolejškova 3

Dynamicky se rozvíjející česká firma založená v roce 1991  
přijme do svých laboratoří v Praze 8 :

2 operátory na AAS

požadujeme : VŠ vzdělání - chemik  
samostatnou osobnost se schopností pracovat v týmu  
znalost práce s počítačem  
znalost alespoň jednoho světového jazyka  
věk do 40 let

laboranta do laboratoře AAS

požadujeme : SŠ vzdělání - chemik  
praxi v analytické laboratoři  
základní znalosti práce s počítačem  
věk do 40 let

laboranty do laboratoří GC/MS a HPLC

požadujeme : SŠ vzdělání - chemik  
praxi v analytické laboratoři  
základní znalosti práce s počítačem  
věk do 40 let

operátora pro zpracování dat

požadujeme : VŠ vzdělání - chemik  
samostatnou osobnost se schopností pracovat v týmu  
dobrou znalost práce na PC  
základní znalosti ekologické legislativy

analytika do laboratoře GC

požadujeme : VŠ vzdělání - chemik  
praxi v oblasti analýz PCB  
samostatnou osobnost se schopností pracovat v týmu  
znalost práce s počítačem  
znalost alespoň jednoho světového jazyka  
věk do 40 let

nabízíme : zajímavou práci v dobrém kolektivu  
dobré platové podmínky  
možnost dalšího osobního rozvoje  
volnou pracovní dobu

V případě zájmu nás můžete kontaktovat na telefonu :

66052076 Dr.Luboš Holý

66053846 Ing.Jan Kutil

Spektroskopická společnost Jana Marca Marci  
adresa sekretariátu : 166 29 Praha 6, Thákurova 7  
Redakční rada : RNDr.M.Fara, CSc, Doc.M.Gricová, CSc  
RNDr.K.Jurek, CSc, RNDr.J.Sysalová, CSc, RNDr.B.Vlčková, CSc  
Technická redakce : P.Vampolová. Redakční uzávěrka : březen 1994  
Pouze pro vnitřní potřebu.  
Uzávěrka příštího čísla Bulletinu : červen 1994

Podávání novinových zásilek povoleno Ředitelstvím pošt Praha  
čj. NP 2495/1993 ze dne 3.1.1994