



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



Spektroskopická společnost

Jana Marca Marci 362

166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

## BULLETIN

SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI  
Jana Marca Marci

Číslo 77

leden 1995

Ve dnech 1.12. až 6.12. 1994 navštívil kolektiv pracovníků Katedry analytické chemie Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity v Brně Univerzitu v La Laguné na ostrově Tenerife v Kanárském souostroví. Účelem návštěvy, která se uskutečnila na základě pozvání pracovníků Katedry analytické chemie, bromatologie a toxikologie Chemické fakulty, byla účast na III. konferenci Španělské spektroskopické společnosti. Konference se zúčastnili:

Prof. RNDr. Josef Havel, DrSc., Doc. RNDr. Vítězslav Otruba, CSc., Doc. RNDr. Josef Komárek, CSc. a RNDr. Viktor Kanický, CSc. Dále se konference zúčastnily dvě postgraduální studentky z Mexika, které v současné době studují na Katedře analytické chemie v Brně: Alma Revilla - Vazquez a Gabriela Vargas - Martinez. Pozvání se uskutečnilo na základě spolupráce Prof. Havla s uvedeným pracovištěm. Na konferenci byly prezentovány tyto příspěvky:

A. Revilla - Vazquez, G. Vargas - Martinez, M. Vrchlabský a J. Havel: Spektrofotometrická multikomponentní analýza směsi  $\alpha$ - a  $\beta$ -naftolu s použitím multivariační kalibrace vyhodnocené metodou PLS: (přednáška)

J. Štěpánková a V. Otruba: Stanovení thalia ve vodách a rostlinných materiálech metodami AAS a AES: (poster)

J. Komárek, P. Stanvinoha, L. Sommer a S. Gomišček: Stanovení mědi metodou ET-AAS po elektrodepozici na diskovou grafitovou elektrodu: (poster)

V. Kanický a J. M. Mermet: Stanovení hlavních složek v přírodních silikátech a vápencích metodou ICP - AES s laserovou ablací: (přednáška)

J. Havel, C. Moreno, M. Valiente a A. Hrdlička: Korekce spektrálních interferencí v AES - ICP metodou multivariační kalibrace s minimalizací PLS: (plenární přednáška)

V průběhu konference se uskutečnila také návštěva hostitelského pracoviště s ukázkou přístrojového vybavení a informacemi o řešené problematice.

*Dr. Viktor Kanický*

## Odborná skupina instrumentálních radioanalytických metod

Dne 6. prosince 1994 se v Klubu MBÚ v Praze 4 - Krči konala schůzka odborné skupiny instrumentálních radioanalytických metod, kde Ing. Vladimír Hnatowicz, DrSc. v přednášce nazvané "Prvková analýza nabitými částicemi v Ústavu jaderné fyziky AV ČR" seznámil přítomné s výsledky dosaženými na pracovišti ÚJF AV ČR a možnostmi uplatnění těchto metod.

Dále přinášíme souhrn přednášky.

*Ing. Miloslav Vobecký*

### PRVKOVÁ ANALÝZA NABITÝMI ČÁSTICEMI v Ústavu jaderné fyziky AV ČR

Zdrojem urychlených nabitých částic pro analytické účely je v ÚJF starší Van de Graaffův elektrostatický lineární urychlovač produkující svazky protonů, deuterionů a iontů He<sup>+</sup> s energiemi 1,0 - 2,5 MeV. Svazky urychlených částic, upravené iontoptickými prvky jsou vedeny do tří terčíkových komor určených pro analýzy metodami RBS (Rutherford Back-Scattering), PIXE (Particle Induced X-Ray Emission) a PIGE (Particle Gamma-Ray Emission). Komory jsou opatřeny zásobníky vzorků, monitory svazku a polovodičovými detektory pro detekci rozptýlených částic, charakteristického rtg záření gama. Spektrometrický signál z detektorů se zpracovává standardní analogovou elektronikou a energetická spektra se zaznamenávají v paměti počítače PC vybaveného MCA deskou a softwarem fy. Canberra Electronics. Vyhodnocení analýz se provádí obvykle off-line na počítačích PC pomocí programů vyvinutých většinou v ÚJF nebo přejatých.

Hlavní cíl své činnosti spatřuje skupina nukleárních analytických metod v ÚJF v dalším rozvoji těchto postupů a především v jejich uplatnění v interdisciplinárním výzkumu, fundamentálním i aplikovaném a v poskytování analytického servisu pracovištím AV i externím zájemcům. V tomto směru byla navázána dlouhodobá spolupráce s řadou pracovišť v ČR i v zahraničí.

Metoda RBS poskytující velmi spolehlivé údaje o struktuře a složení povrchu pevných látek se uplatňuje zejména při studiu procesů iontové implantace (spolupráce s Beloruskou universitou, Minsk), procesů na rozhraní dvou prostředí např. kov-polymer (spolupráce s GSI, Darmstadt, BRD), deponice a vlastnosti tenkých povrchových vrstev (spolupráce s Fakultou strojní ČVUT a s FzÚ AV ČR, Praha) nebo vlastností radiačně poškozených polymerů (spolupráce s Hahn-Meitner Inst., Berlin a s VŠCHT, Praha). Metoda RBS umožňuje stanovení prakticky všech prvků s detekčními mezemi  $10^{14}$  at.cm<sup>-2</sup> (lehké prvky) -  $10^{12}$  at.cm<sup>-2</sup> (těžké prvky) a hloubkovým rozlišením kolem 10 nm.

Metoda PIXE je vhodná pro stanovení prvkového složení látek s detekčními mezemi na úrovni  $\geq 1$  ppm pro prvky se  $Z \geq 13$ . Analyzované množství látky je zhruba určeno doletem budících částic ve vzorku a pohybuje se na úrovni několika až několika desítek mg. Metoda PIXE se s výhodou uplatňuje zejména při analýzách tenkých vzorků jakými jsou např. aerosoly nebo popílky shromážděné na tenkých filtrech (životní prostředí), tenké deponované vrstvy (materiálový výzkum), tenké řezy biologických objektů (medicina) a odpadky z analyzovaných tekutin. Práškové látky se analyzují jako tlusté vzorky připravené ve formě tablet lisováním z výchozího materiálu po případném přidání vhodného pojiva (glukoza, grafit). Program PIXE-INP vyvinutý v ÚJF umožňuje kvantitativní vyhodnocení analýz PIXE tenkých i tlustých vzorků. Část metodických prací při vývoji metody PIXE byla provedena v rámci mezinárodního programu HEMET (heavy metal emission) koordinovaného ECÚ a.s. Praha.

Paralelně, jako komplementární k metodě PIXE, byla rozvíjena i metoda PIGE umožňující v tlustých vzorcích stanovení některých lehkých prvků se  $Z \leq 14$  a s detekčními mezemi  $\geq 15$  ppm. Dnešní experimentální uspořádání v ÚJF ovšem neumožňuje současnou analýzu jednoho vzorku metodami PIXE a PIGE. K širšímu uplatnění metod PIXE a PIGE přispěje v budoucnosti těsnější spolupráce se skupinou zabývající se analýzami metodou INAA, která v r. 1994 přešla do ÚJF AV ČR.

Budoucnost nukleárních analytických metod v ČR závisí především na způsobu jejich financování a s tím těsně souvisejícím personálním zajištěním. Nukleární analytické metody, vázané nba provoz nákladných zařízení, urychlovačů a jaderných reaktorů, jsou relativně drahé a tedy z čistě praktického hlediska těžko konkurenceschopné. Na druhé straně se ale tyto postupy vyznačují řadou specifických vlastností, které je činí v mnoha ohledech nezastupitelnými. Česká republika jako relativně vysoce rozvinutý stát s dosud poměrně rozsáhlým základním i aplikovaným výzkumem by si měla podržet alespoň základní spektrum těchto analytických postupů, a to i za cenu jejich dočasného financování státem včetně některých nevyhnutelných investic. Racionálním řešením by bylo vytvoření jednoho analytického pracoviště vybaveného špičkovou technikou, které by bylo dostupné pro všechny zainteresované pracovníky z AV ČR, VŠ a dalších resortů. Jako přirozené sídlo takového pracoviště se jeví ÚJF AV ČR v Řeži, kde je již nyní soustředěna hlavní část existující analytické kapacity.

*Dr. Vladimír Hnatowicz*

KDO BYL PRŮKOPNÍKEM VIBRAČNÍ SPEKTROSKOPIE NA UNIVERSITĚ KARLOVĚ,  
aneb  
blahopřání k 65. narozeninám doc.RNDr.Bohuslava Straucha, CSC

Pohlédneme-li okem tzv. mladších kolegů na současnou činnou práci docenta B. Straucha na katedře anorganické chemie Přírodovědecké fakulty University Karlovy, ve vedení vibračně-spektroskopické sekce Spektroskopické společnosti JMM, při organizaci kurzů vibračně-spektroskopických a v akademickém světě vůbec, nabudeme snadno dojem, že existují lidé, pro něž se biologický čas zastavil tak někde kolem čtyřicítky - a stárnou prostě jen ti druzí.

Těžko lze tedy uvěřit, že historie Ramanovy spektroskopie na Přírodovědecké fakultě University Karlovy začíná již v r. 1960, kdy B. Strauch, tehdy jako začínající asistent na katedře anorganické chemie, uvedl do provozu 3-hranolový spektrograf s nástavcem na měření Ramanových spekter ISP 51. Konstrukce přístroje a excitace Hg výbojkou umožňovaly měření pouze koncentrovaných vodných roztoků studovaných látek a vyžadovaly od experimentátora značnou trpělivost, vynalézavost a vědecké nadšení - to jsou však vlastnosti, které B. Strauchovi nikdy nechyběly. Z řady Ramanových spekter anorganických látek (sírodusíkatých sloučenin, komplexů kyseliny vinné s přechodnými kovy a dalších), které B. Strauch publikoval v letech 1960-74, si připomeňme práci citovanou v několika zahraničních monografiích, zabývající se využitím depolarizačních poměrů Ramanových pásů k odlišení monodentátní a bidentátní koordinace dusičnanového aniontu na centrální atom v nitrátových komplexech Sc, Y a lanthanoidů. Pořízení spektrometru pro IČ spektroskopii (vibračně-spektroskopickou metodu komplementární k Ramanově spektroskopii) pak umožnilo B. Strauchovi a jeho studentům získávat a analyzovat kompletní vibrační spektra molekul a krystalů. B. Strauch spolu s J. Loubem připravili a vedli moderní, studenty oblíbené a odborně fundované pokročilé praktikum "Molekulová a krystalová struktura", které umožňovalo studentům poznat a porovnat přímé (RTG-strukturní analýza) a nepřímé (vibrační spektroskopie) metody studia struktury

ry látek.

Díky nesmírnému úsilí B. Straucha o to, aby výuka a výzkum v oblasti vibrační spektroskopie u nás nezaostávaly za vývojem ve světě, se podařilo v r. 1974 instalovat na katedře anorganické chemie PŘF UK moderní Ramanův spektrometr JEOL buzený argonovým laserem, který umožňoval měření pevných, kapalných i plynných vzorků. Laserová excitace umožňovala rovněž měření preresonančních a rezonančních Ramanových spekter vhodně absorbujících látek, a to i v poměru nízkých koncentrací vhodných pro studium biomolekul. Změřena, interpretována a publikována byla Ramanova spektra acetylacetonátových komplexů přechodných kovů a řada RR spekter biomolekul, např. cytochromu 450 a bakteriorhodopsinu.

Neméně významná a velmi úspěšná byla (a stále je) snaha B. Straucha o seznámení české spektroskopické veřejnosti s moderními vibračně-spektroskopickými metodami a technikami. Z rozsáhlé činnosti B. Straucha v této oblasti připomeňme jeho pojednání "Laserova Ramanova spektroskopie" a "IČ spektroskopie s Fourierovou transformací" uveřejněná nejprve v 3. díle knihy "Nové směry v analytické chemii", a později, v nové přepracované anglické verzi, v knize "Instrumentation in Analytical Chemistry", Vol.2.

Ríká se, že visitkou pedagoga jsou jeho žáci. Těžko bychom dnes již spočítali absolventy vibračně-spektroskopické školy doc. Straucha. Ať už dnes působí v akademickém světě či v byznysu, doma či v zahraničí, vedou si dobře. Určité proto, že pod vedením doc. Straucha získali dobré základy nejen odborné, ale i všeobecné lidské. A proto k našemu blahopřání připojujeme za ně za všechny: "Díky, pane profesore".

Přejeme Vám, milý kolego, do dalších let hodně zdraví a dalších úspěchů ve vědě i mimo ni- a také radosti z rozvoje vibrační spektroskopie u nás!

*Za předsednictvo Spektroskopické společnosti JMM  
B. Vlčková*

#### PLÁN ODBORNÝCH AKCÍ NA ROK 1995

- a) 10. spektroskopická konference  
(3 dny, červen, Lanškroun)
- b) Využití spektroskopie v medicíně  
(4 dny, I. čtvrtletí, Praha)

#### Sekce optické atomové spektroskopie

- a) Kurz AAS  
(5 dnů, duben, Chlum u Třeboně)
- b) Kurz ICP  
(4 dny, září, Čeložnice)  
ve spolupráci s firmou 2 THETA
- c) seminář "Anorganická analýza v ŽP"  
(4 dny, březen, Komorní Lhotka)
- d) Automatická spektrometrie  
(květen, žermanická přehrada)
- e) Zajištění jakosti analytických výsledků  
(5 dnů, duben, Praha)

#### Sekce molekulové spektroskopie

- OS vibrační spektroskopie
- a) Kurz měření vibračních spekter  
(5 dnů, únor, Praha)
  - b) Kurz interpretace vibračních spekter  
(5 dnů, únor, Praha)

OS magnetické rezonanční spektroskopie  
11. NMR při 10. spektroskopické konferenci

#### Komise

Seminář Komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí a Komise pro referenční materiály  
"Organická analýza v ŽP"  
(5 dnů, listopad, místo bude upřesněno)

#### KONFERENCE V ZAHRANIČÍ

ESIS 95 - Microspectroscopy : FTIR and Raman  
Lyon, France, 15.-16.6.1995  
G. Lachenal  
Lab. des Mat. Plastiques et Biomateriaux  
Université Claude Bernard Lyon I  
43 Boulevard du 11 Novembre  
69622 Villeurbanne Cedex, France

12th International NMR Meeting  
Manchester, UK, 2.-7.7.1995  
Dr. J. F. Gibson, Royal Society of Chemistry  
Burlington House  
Picadilly  
London W1V 0BN, United Kingdom

XXIX Colloquium Spectroscopicum Internationale  
Leipzig, Germany, 27.8.-1.9.1995  
Gesellschaft Deutscher Chemiker  
Fachgruppe Analytische Chemie  
P.O. Box 90 04 40  
D-60444 Frankfurt/Main, Germany

XXIX CSI: Post-Symposium ICP-MS and  
11. German ICP-MS Users Meeting  
Wernigerode, Germany, 1.-4.9.1995  
Prof. Liselotte Moenke  
Dep. of Chemistry  
Martin-Luther-University Halle-Wittenberg  
Inst. of Analytical and Environmental Chemistry  
Weinbergweg 16  
D-06120 Halle, Germany

12th International Symposium on Plasma Chemistry  
Minneapolis, USA, 20.-25.8.1995  
L. Grafen  
315 Pillsbury Drive SE  
University of Minnesota  
Minneapolis, MN 55455-0139, USA

13th Australian Symposium on Analytical Chemistry  
and 4th Environmental Chemistry Conference  
Darwin, Australia, 9.-14.7.1995  
Symposium Secretariat  
Convention Catalyst Int.,  
GPO Box 2541  
Darwin, NT 0801, Australia

## FLUORESCENCE MICROSCOPY AND FLUORESCENT PROBES

jsou tématem konference, kterou uspořádá Fyzikální ústav Karlovy University ve spolupráci s Fyziologickým ústavem AV ČR v Praze ve dnech 25.-28.6.1995.

Bohatý program konference je členěn na novinky v oboru, pracovní techniky a aplikace, a to ve více než třiceti tématických skupinách.

Bližší informace a přihlášky lze získat na adrese:

Jan Slavík  
Fyziologický ústav AV ČR  
Videňská 1083  
142 20 Praha 4-Krč  
tel.: (02) 47 52 249  
fax : (02) 37 40 68

## ZÁJEMCI O KOUPI A PRODEJ POUŽITÝCH PŘÍSTROJŮ

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

**FLURA Inc.**, Černokostecká 2, 100 00 Praha 10  
Tel/fax (02) 778728

Firma FLURA nabízí dodávku křemenných a skleněných fluorescenčních kyvet za velmi výhodné ceny. Možnost výroby křemenného skla na objednávku.

**Polymer Institut Brno**, Tkalcovská 2, 656 49 Brno  
Dr.Zdeněk Fiala, tel. (05) 45321240

odprodá elektromagnet od NMR spektrometru Tesla BS 567A  
(magnetické pole 2,35 Tesla)

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 : leden 1995  
Pouze pro vnitřní potřebu.

Uzávěrka příštího čísla Bulletinu : březen 1995

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

# 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