



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI

BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
Jana Marca Marci

Číslo 80

říjen 1995

Ke stému výročí objevu rentgenových paprsků

Bohumil Kratochvíl

Poslední dekáda minulého století je spjata se dvěma mimořádně důležitými objevy. V roce 1895 pozoroval Wilhelm Conrad Röntgen v katodové trubici záření, které pojmenoval paprsky X a o rok později Antoine Henri Becquerel zjistil, že podvojný síran uranylo-draselný emituje paprsky, které pronikají hmotou a způsobují zčernání fotografické desky. Z historického hlediska lze jen těžko vysvětlit, proč následovníci volili v prvním případě pojmenování Röntgenovo záření, které se později přetvořilo na novotvar *rentgenové záření* (zkráceně RTG nebo rtg)^a, zatímco u druhého objevu byl původní pojem Becquerelovo záření vytlačen označením *radioaktivita* (manželé Curieovi, 1898). Na hledání souvislosti obou jevů se později podílela řada badatelů, což vyvrcholilo v obecnou formulaci vlnově - korpuskulárního dualismu v chování mikroobjektů (L.de Broglie, 1924).

Vraťme se ale k letošnímu jubileu Röntgenova objevu. Již v roce 1897 Röntgen publikoval studii o široké škále vlastností svých paprsků X. Paprsky byly neviditelné, různě pronikaly rozmanitými látkami, u kyanoplatnatanu barnatého a sulfidu zinečnatého budily intenzivní fluorescenci, ionizovaly vzduch a nebylo je možné vychýlit z přímočaré dráhy magnetem. Zejména však prostupovaly lidským tělem a zobrazovaly strukturu a obrysy kostí, protože v nich se převážně absorbovaly. Z této doby pochází i první slavná rtg fotografie kostry ruky paní Röntgenové. To vše podnítilo obrovský zájem o Röntgenův objev mezi vědci, techniky a lékaři. Pro rozvoj chemie a fyziky byly důležité pokusy, které provedl s rtg paprsky C.G.Barkla v letech 1905-1911. Ten ukázal, že rtg záření se stejně jako viditelné světlo polarizuje rozptylem a dále objevil v rtg spektru terčků různých anod charakteristické záření, což bylo později úspěšně korelováno s Bohrovým atomovým modelem.

Mezníkem širokého využití rtg záření ve vědě se stal rok 1912. Jeho počátkem napadlo M. von Laueho, po diskuzi s P.P. Ewaldem, že krystaly, u nichž se již tehdy předpokládala periodicky uspořádaná struktura, by mohly sloužit jako ideální mřížka pro difrakci rtg záření. Uvědomil si totiž, že vlnová délka rtg paprsků musí být řádově shodná se vzdáleností rozptylujících center v krystalu. Laueho hypotézu experimentálně dokázali ještě téhož roku jeho asistenti W.Friedrich a R.Knipping, když získali první difrakční záznam krystalické látky - sulfidu zinečnatého. Významný Laueho objev nedestruktivní interakce rtg záření s krystalickými materiály vedl ke vzniku nového vědního oboru - *rtg strukturní krystalografie*, jejíž rozvoj je spojen se jmény otce a syna W.H. a W.L. Bragga. Ti poznali, že v difrakčním obraze krystalu musí být zakódována informace o jeho struktuře a v letech 1912-13 se jim podařilo stanovit první krystalové struktury chloridu sodného a draselného. Vedle toho vyplynula později z prací Braggů i možnost *kvalitativní* a později i *kvantitativní fázové analýzy* pevných látek (P. Debye a P. Scherrer, 1916; A.V. Hull, 1919).

Jako další důležité odvětví, využití interakce rtg záření s pevnými látkami, se začala vyvíjet i *rtg spektrometrie*, jejíž počátky jsou spojeny s pracemi Braggů a hlavně H.G.J. Moseleyho (1913-14). Braggové sestrojili první rtg spektrometr a Moseley dokázal, že existuje vztah mezi vlnovou délkou rtg spektrální linie a atomovým číslem. Vedle toho zjistil také závislost mezi intenzitou linie a obsahem prvku ve vzorku. Tím položil základ *kvalitativní a kvantitativní rtg spektrochemické analýze*. Další průkopnické práce v tomto oboru vykonali M. Siegbahn (1913-23), změřením vlnových délek rtg spekter řady prvků a A. Hadding (1922), který poprvé použil rtg spektroskopii k prvkové analýze minerálů.

Slavný objev würzburgského universitního profesora fyziky Röntgena, se ukázal pro další lidský pokrok jako nesmírně významný. I když jsme podrobněji zmínili pouze jeho vliv na vznik některých fyzikálně chemických metod, současné spektrum rtg aplikací je daleko širší. Zahnuje zejména lékařskou diagnostiku a terapii, defektoskopii, strukturní a diagnostické studium pevných látek, kapalin a plazmatu, kontinuální analýzu technologických procesů, analýzu materiálů a jejich povrchů, ale také spektrální výzkum hvězd, galaxií a zbytků supernov.

Pojem *rentgenový styl* pronikl dokonce i do umění, kde označuje maliřskou techniku dřívějších loveckých etnik severní Evropy, Asie a Ameriky, používanou pro magické zobrazování zvířat i s vnitřními orgány. Slovo *rentgenovat* je dnes pro nás synonymem k odhalení něčeho skrytého, utajeného.

W.C.Röntgen obdržel v roce 1901 za svůj objev Nobelovu cenu a po něm desítky dalších, kteří se zasloužili o vznik a rozvoj některé z rtg aplikací. Jména mnohých z nich jsou uvedena i v tomto příspěvku. Dnes, po sto letech, si celý kulturní svět připomíná jubileum rtg záření. I u nás jsou na toto téma pořádány konference^{1,2}, publi-

kuji se články³. Necht' i tato krátká zmínka je připomenutím události, která tak významně ovlivnila několik generací.

- a V anglosaské literatuře se však dodnes používá pojem X-rays
- 1 100 let rentgenových paprsků. Celostátní přehlídka studentských a doktorandských prací, FJFI ČVUT Praha, 14. června 1995
- 2 100 let od objevu rentgenového záření. Celostátní seminář, TU v Liberci, 14.-15. září 1995
- 3 Kraus I.: Vesmír 9, 504 (1955)

CANAS '95 - Colloquium Analytische Atomspektroskopie Kostnice, 2.-7. 4. 1995

Zdeněk Slovák

Důsledkem sjednocení Německa byla i dohoda o spojení dvou velkých periodicky konaných konferencí - východoněmeckých "Analytikertreffen - Atomspektroskopie" a kostnických "CAS" pod společným názvem CANAS, označením dobře známým ve střední a východní Evropě. Tyto konference oslovovaly programově široké vrstvy praktikujících německých spektroskopiků a umožňovaly výměnu zkušeností zvláště velkým prostorem věnovaným vždy posterovým sekcím. Navázání na tradice CANAS znamená snahu pořadatelů o postupné rozšiřování významu konference i mimo německy mluvící evropský prostor.

Letošní konference se zúčastnilo okolo 450 spektroskopiků z 16 zemí. V celkovém počtu 80 zahraničních účastníků byli zastoupeni hlavně Rakušané a Švýcaři, z postkomunistických zemí Slováci. Během konference zaznělo 6 přednášek a 52 krátkých sdělení (konference nebyla dělena na paralelní sekce, čehož účastníci navzdory krásnému jarnímu počasí hojně využívali k získání přehledu o dění v celém oboru atomové spektroskopie). Sdělení byla členěna do námětových celků: grafitové atomizátory, stanovení specií, chemometrie, RFA a ICP, flow injection (pozoruhodná přednáška „otce“ metody, prof. J. Růžičky, působícího nyní v Seatlu, USA), životní prostředí, rozklady a příprava vzorků, lékařství a biologické materiály. Tato široká problematika byla i obsahem celkem 112 plakátových sdělení rozdělených do 4 skupin, které byly všechny vystaveny po celou dobu trvání konference. Jednotlivé skupiny posterů pak byly v jednotlivé dny přehledně uvedeny v plénu před následující hodinovou "posterovou sekcí" (obvykle uprostřed dopoledního zasedání). Proběhla též soutěž o nejlepší poster (zvítězil tým pracovníků ISAS/LSMU Berlin) dotovaná cenami (osobně pochybuji o možnosti objektivního srovnání a hodnocení posterů věnovaných teoretickým problémům spektroskopie i jejím praktickým aplikacím). Pozoruhodná byla vysoká účast na všech odborných akcích.

Při CANAS '95 se nekonala výstava výrobců přístrojové techniky. Tato skutečnost rozhodně přispěla soustředění na vlastní tématiku konference - převážná většina debat probíhala u posterů. Jedinou komerčně motivovanou, nicméně i odborně zajímavou akcí byla exkurze do výrobních provozů, aplikačních laboratoří a přístrojového muzea fy. PERKIN-ELMER Bodenseewerk Ueberlingen spojená s příjemnou plavbou po Bodamském jezeře.

Pořadatelé konference vyšli vstříc žádosti naší Společnosti a k materiálům konference pro všechny účastníky přiložili náš informační leták přibližující osobnost Jana Marca Marci při příležitosti jeho 400 letého jubilea.

Souhry přednášek a posterů jsou k dispozici u účastníka konference, Zdeňka Slováka, LACHEMA, a.s., 621 33 Brno, který i touto cestou děkuje organizátorům za milé pozvání.

Schůze odborné skupiny magnetické rezonanční spektroskopie

se uskutečnila dne 15.6.1995 v Lanškrouně za účasti 36 členů skupiny. Na schůzi, kterou připravil a řídil předseda skupiny Doc. Miroslav Holík, byli přítomni seznámeni s aktivitou německé diskusní skupiny NMR, tak jak se jeví z článku v lednovém čísle *Spectroscopy Europe* a z korespondence prof. Bluemicha s Doc. Holíkem. Jde především o lepší propojenost a informovanost jednotlivých skupin v Evropě, především prostřednictvím včasných oznámení o akcích v *Spectroscopy Europe* a pořádáním konference jednou za dva roky. V roce 1995 bude pořadatelem konference Polsko. Přítomní členové skupiny souhlasili s uspořádáním podobné konference v ČR. Prof. Ksandr připomněl, že již v sedmdesátých letech byla odborná skupina spolupořadatelem obdobné konference ve spolupráci s bývalou NDR.

Koordinace akcí a spolupráce v Evropě je možná též přes Federaci evropských chemických společností, neboť většina odborných skupin NMR v zahraničí je organizována u národních chemických společností. Doc. Holík byl pověřen, aby s předsedou Spektroskopické společnosti JMM prof. Volkou projednal podrobnosti v této záležitosti.

V roce 1996 se uskuteční třídní národní konference NMR opět ve Valticích a pozvání budou kolegové z oboru EPR; tato část odborné skupiny ale bude kromě toho pořádát vlastní seminář na Pezinské Babě za stejných podmínek jako v minulosti (tj. se stejným finančním zvýhodněním českých a slovenských účastníků).

3. mezinárodní symposium o aplikované hmotnostní spektrometrii spojené s evropskou konferencí o tandemové hmotnostní spektrometrii

Miroslav Ryska

Symposium se konalo po pětileté přestávce v Barceloně ve dnech 9.-13. července 1995 pod předsednictvím profesora Emilio Gelpiho v krásném prostředí barcelonského Paláce kongresů. Základními tématy symposia byly :

- 1) nové vývoje v hmotnostně spektrometrické instrumentaci a nové techniky
- 2) vývoje tandemových hmotnostně spektrometrických technik
- 3) excitace a fragmentace iontů
- 4) biomolekuly o vysokých hmotnostech
- 5) nové trendy a horizonty kombinovaných chromatografických a hmotnostně spektrometrických technik
- 6) aplikace hmotnostní spektrometrie v :
 - a) klinických metabolických a biochemických studiích
 - b) molekulární biologie a biotechnologii
 - c) mapování peptidů a chemie proteinů
 - d) oblasti makromolekulárních biopolymerů
 - e) chemii životního prostředí
 - f) potravinářské chemii
 - g) toxikologii a dopingové kontrole
 - h) metodách zkoušení léků
 - i) farmakologii
 - j) mikrobiologii
 - k) kvantitativní analýze
 - l) základních studiích fragmentačních mechanismů biomolekul.

Vědecký program symposia tvořily 3 plenární přednášky, 21 orálních a 191 plakátových sdělení. Plenární přednášky vesměs vysoké úrovně byly předneseny prof. F.W. McLaffertym, prof. T.A. Bailliem a prof. P. Roepstorffem. Rovněž většina orálních sdělení byla na vysoké úrovni. Všechna plakátová sdělení, ač rozdělena do jednotlivých sekcí, byla vyvěšena v prostorném sále po celou dobu symposia, což umožnilo všem účastníkům se s nimi seznámit a připravit se na diskusní sekce, jež byly dvakrát opakovány.

Symposium, jehož se zúčastnilo na 400 účastníků, bylo dokonale organizačně zajištěno prof. Gelpim. Bylo jasnou demonstrací současných vývojových trendů, tj. ionizace elektrosprejem, ionizace laserem za asistence matrice MALDI s analyzátozem doby letu TOF a technik na principu iontové pasti a iontové cyklotronové rezonance.

6. Evropská konference o spektroskopii biomolekul (6th ECSEM)

Blanka Vlčková

Ve dnech 3.-8. září 1995 se ve francouzském městě Lille konala 6. Evropská konference o spektroskopii biomolekul (ECSEM). ECSEM slavila letos 10. výročí: od r. 1985 jsou tyto konference pořádány každým druhým rokem na některém z významných evropských spektroskopických pracovišť. Pořadatelem letošní ECSEM byla Université de Sciences et Technologie Lille za přispění řady francouzských i mezinárodních institucí a organizací. Konference se zúčastnilo 270 účastníků nejen z evropských zemí, ale i z USA, Kanady, Japonska i dalších zámořských zemí. Česká republika byla na konferenci zastoupena třemi účastníky (2 z MFF UK a 1 z PřF UK). Na konferenci bylo předneseno 8 plenárních, 12 zvaných a 20 krátkých přednášek (konference neměla paralelní sekce); prezentováno bylo 213 posterů (vyvěšených po celou dobu trvání konference a diskutovaných postupně ve 3 odpoledních posterových sekcích). Byla rovněž uspořádána 2 mikrosymposia na téma SERS a interakce biomolekul s povrchy a Spektroskopické studium buněk; jejich paralelní konání bylo jediným nedostatkem jinak výborně zorganizované konference.

Po metodické stránce byly nejvýznamněji zastoupeny prezentace z oblasti vibrační spektroskopie: FTIR, Ramanovy, rezonanční Ramanovy a povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie (SERS) zaměřené jednak na studium biologicky významných molekul a jejich funkčních systémů, jednak na studium složení a struktury vzorků tkání, klinických preparátů i potravinářských surovin a výrobků. Dále byla v přednáškách a posterech věnována pozornost aplikacím mikrospektroskopických technik pro spektrální mapování biologických objektů, využití časově rozlišených spektroskopii pro studium struktury excitovaných stavů biomolekul a velmi rychlých procesů v organizovaných systémech biomolekul (např. ve fotosyntetických reakčních centrech), nejnovějšímu vývoji v oblasti vibrační optické aktivity biomolekul, současným možností kvantově-chemické analýzy normálních vibračních módů biomolekul jakož i studiím využívajícím kombinace metod vibrační elektronové (absorpční i emisní) a magnetické rezonanční (NMR a EPR) spektroskopie k objasňování struktury a funkce složitějších biomolekul a jejich funkčních systémů. Účastníci z ČR přispěli k programu konference i krátkou přednáškou a vystoupením na mikrosymposiu (B. Vlčková) a třemi postery (V. Baumruk, M. Procházka, B. Vlčková).

Abstrakty konferenčních příspěvků byly publikovány v knize *Spectroscopy of Biological Molecules*, J.C. Merlin et al., Ed. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1995. Díky tomu, že editoři uspořádali příspěvky nikoli podle typu prezentace, ale podle studované problematiky, vznikla hodnotná přehledová publikace vhodná i jako studijní materiál.

Úctyhodný počet prezentací (zejména posterů), hojná a velmi aktivní účast studentů, bohaté a neformální diskuse, jak v přednáškovém sále, tak u posterů a v kuloárech, a přátelská a tvůrčí atmosféra celé konference dokumentovaly bouřlivý rozvoj oboru označovaného jako "biospektroskopie". Založení nového mezinárodního časopisu "Biospectroscopy" (editor L. Nafie), jehož první čísla byla na konferenci prezentována a diskutována, se setkalo s kladným ohlasem u většiny účastníků konference. Od nového časopisu se očekává usnadnění komunikace v oboru při zachování vysoké odborné úrovně prezentací dosažené v prvních číslech.

Závěrem lze jen zopakovat upřímné poděkování za vynikající organizaci jak odborného, tak společenského programu, které účastníci v závěru konference vyslovili organizátorům, t.j. J.C. Merlinovi, S. Turrell a jejich kolegům, a oznámit konání příští ECEMS v r. 1997 ve Španělsku poblíž Madridu.

PŘIPRAVOVANÉ KONFERENCE

9. REGIONÁLNÍ (EVROPSKÁ) KONFERENCE IUAPPA 3. MEZINÁRODNÍ KONFERENCE HODNOCENÍ VLIVŮ NA ŽIVOTNÍ PROSTŘEDÍ 1996

aktuální úkoly z pohledu národních a mezinárodních zkušeností
Praha, 23. - 26. září 1996

Pořádají:

IUAPPA, Ministerstvo životního prostředí České republiky, Česká zemědělská univerzita v Praze, TBV Science London, Vodní stavby a.s., Praha, Vodohospodářský rozvoj a výstavba Praha, Hydroprojekt a.s., Praha, Svaz průmyslu a dopravy České republiky, Fakulta elektrotechnická ČVUT, Fakulta stavební ČVUT, Česká asociace IUAPPA

Cíl a zaměření konference

Cílem konference je prezentace současného stavu a dosaženého pokroku v oblasti hodnocení vlivů, péče a obnovy životního prostředí a aktuálních a specifických úkolů v období transformace národního hospodářství a celé společnosti z pohledu našich a mezinárodních zkušeností. Konference se zaměřuje na novodobé národní a mezinárodní zkušenosti z oblasti posuzování a hodnocení vlivů lidské činnosti na ovzduší, vodu, půdu, ekosystémy a zdraví člověka. Dále se konference věnuje strategii trvale udržitelného rozvoje, legislativě, normám a předpisům, zkušenostem z mezinárodní spolupráce a environmentální výchově na všech stupních škol.

Tematické okruhy konference:

- A. EIA, hodnocení rizik, audit a monitorování ŽP
- B. technika, technologie a výzkum v oblasti ochrany a zlepšení ŽP (ovzduší, voda, půda, hluk, odpady, vibrace, budovy)
- C. legislativa, normy a předpisy, ekonomické nástroje, výchova

Žádost o zaslání předběžné přihlášky s bližšími informacemi zasílejte na adresu :

ČVUT FEL, katedra fyziky
Ing. Rudolf Dálek, CSc, "ŽP 96"
166 27 Praha 6 - Dejvice, Technická 2
Tel.: (02) 24352332, Fax: (02) 24310784,
E-mail : zp96@feld.cvut.cz

Anotace referátů v rozsahu 10 - 15 řádků se přijímají do 31.10.95



NABÍDKOVÁ A POPTÁVKOVÁ SLUŽBA ČLENŮM SPOLEČNOSTI

SBĚR DAT ZE SPEKTROFOTOMETRU SPECORD M40

Na našem pracovišti byla ověřena možnost jednoduchým způsobem provádět sběr dat ze spektrofotometru SPECORD M40. Do elektroniky spektrofotometru není zasáhnuto (důležitá okolnost pro smluvní servis), jeho funkce není nijak omezena. Data jsou posílána po sériové lince RS 232 do počítače PC. Spektrofotometr není ale možno z PC ovládat. V současné době je zadána výroba do externí elektronické firmy. Ta je samozřejmě zainteresována na počtu kusů, což pro zákazníka znamená snížení ceny. Cenově by se mělo připojení pohybovat pod 9000 Kč. Základní software pro sběr dat vyvinutý u nás bude dodáván výrobcem.

Podrobné informace o zařízení podá a kontakt s výrobcem zajistí:

Ing. Jiří Jeřábek
odd. optických krystalů
Fyzikální ústav AV ČR
Cukrovarnická 10
162 00 Praha 6
tel.: zam.: (02) 24 31 11 37, linka 440
byt: (02) 73 02 07

LABTECH s.r.o., Polní 23/25, 639 00 Brno,
Ing. Povolný nebo RNDr. Kolčava, tel. 05 4332 1222, Fax 05 4321 0115,
nabízí k prodeji :

- **atomový absorpční spektrofotometr** Varian AA 875 ABQ včetně elektrotermického atomizátoru CRA-90 a automatického dávkovače ASD-53. Rok výroby 1980, stav přístroje funkční. Předpokládaná cena cca 50 000 Kč.
- **tavička Herrmann-Moritz**, zařízení pro přípravu tablet pro XRF analýzu. Rok výroby 1979, stav přístroje funkční, málo používaný. Předpokládaná cena 15 000 Kč.

GENERÁTOR OBLOUKU PRO SPEKTROGRAF PGS

popřípadě obdobný

koupí:

Dr. Viktor Sember
Ústav fyziky plazmatu AV ČR
Za Slovankou 3
Praha 6
tel. (02) 6605 2887, (02) 6605 3117.

Spektroskopická společnost Jana Marca Marci
adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6

redakční rada:
Dr. M. Fara, Doc. M. Gricová, Dr. K. Jurek, Dr. J. Sysalová, Dr. B. Vlčková
tech. redakce:
P. Vampolová

redakční uzávěrka: září 1995, uzávěrka příštího čísla: prosinec 1995

Pouze pro vnitřní potřebu.

**Podávání novinových zásilek povoleno Ředitelstvím pošt Praha,
čj. NP 2495/1993 ze dne 3. 1. 1994**