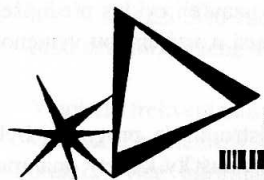


Spektroskopická společnost

Jana Marca Marci

166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

405



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARCA MARCI

Číslo 97

únor 1999

Kurzy vibrační spektroskopie

Doc. Bohuslav Strauch

Odborná skupina vibrační spektroskopie pořádala opět své dva tradiční týdenní kurzy v již tradičním čase - koncem ledna a počátkem února. Kurzy se opět konaly v budově pražské Vysoké školy chemicko-technologické v prostorách Ústavu analytické chemie a na spektrálním pracovišti centrálních laboratoří.

„Měření infračervených spekter“, 25. - 29.ledna 1999 (31 účastníků)

Po obdržení kurzovních materiálů (základní typy spekter, tabulky používaných metod, chybná spektra, seznam literatury z vibrační spektroskopie) byli frekventanti rozděleni do pěti pracovních skupin a od Doc. Straucha se jim dostalo základních informací o koncepci a organizaci kurzu, o literatuře ve vibrační spektroskopii.

Na úvodní přednášku Dr. Hilgarda o základních pojmech a popisu spekter navázala přednáška Dr. Pásztor (Nicodom) o principech FTIR-spektroskopie. Důležitou částí programu tohoto kurzu je vždy informace o přípravě vzorků a používané standardní techniky při měření IČ spekter (Ing. M. Novotná). O principech reflexní spektroskopie pohovořil Ing. Machovič, který věnoval pozornost též využití internetové sítě. Počítačové zpracování spekter a použití spektrálních knihoven opět obstarala Ing. Novotná. Blízkou IČ oblastí a jejím využitím v kvantitativní chemické analýze se zabýval Ing. Tenkl (Nicodom). Dr. Šíkola (Bruker) přednášel o možnostech spojení FTIR spektrometrů s dalšími metodikami a o FT-Ramanových spektrometrech. Doc. Strauch upozornil na nepravé pásy ve spektrech a věnoval se zdrojům a příčinám chyb v měřených spektrech. Samostatná přednáška byla tentokrát o IČ mikroskopii (Dr. Dominák, Nicodom). Doc. Horák shrnul přínos a postavení vibrační

spektroskopie ve vědě a praxi. Ing. Novotná s Ing. Machovičem uzavřeli cyklus přednášek konkrétními příklady praktického použití IČ spektroskopie, diskusí a vzájemnou výměnou zkušeností s frekventanty kurzu.

Odpolední náplní byla praktická cvičení v pěti skupinách u přístrojů. Na programu byla metodika měření IČ spekter kapalin a plynů, kalibrace a měření tloušťky květy, manipulace s optickým materiálem, příprava tablet a emulzí v pevné fázi a problémy s tím spojené, aplikace ATR a DRIFT v reflexní spektroskopii. Programové vybavení a zpracování spekter, měření v blízké IČ oblasti (NIR) a kvantitativní analýze tvořily samostatné praktické úlohy. Vedle semináře uživatelů přístrojů Nicolet se zástupci firmy absolvovala menší skupina frekventantů demonstraci měření s infračerveným mikroskopem v systému Genesis/Mattson (Dr. Němec, Přírodovědecká fakulta UK, Praha).

Na praktických cvičeních se podíleli Dr. Janečková, Ing. Kohoutová, Dr. Matějka, Ing. Machovič, Mgr. Kesner a Dr. Pásztor (Nicodom).

V tradiční závěrečné anketě frekventantů byl kurz hodnocen velmi příznivě, vedle některých individuálních přání nicméně vyplynul obecný požadavek, aby vzájemné představení frekventantů a informace, co kdo dělá, byly zařazeny na zahájení kurzu pro lepší průběžně vzájemné prohloubení kontaktů a výměnu zkušeností, což lze realizovat.

Pracovní atmosféra kurzu, zájem a iniciativa frekventantů byly uspokojivé.

„Interpretace vibračních spekter“, 1. - 5. února 1999 (24 účastníků)

Úvodem obdrželi účastníci kurzu rozsáhlý interpretační materiál (cca 100 stran). První přednáška byla věnována teorii vibračních spekter jednoduchých molekul, základním vibračním modům a jejich klasifikaci (Doc. Strauch). Dr. Hilgard se zabýval interpretačními aplikacemi jako charakteristické frekvence, vlivy spřažení a vnitromolekulární efekty, teoretické téma doplnil Doc. Horák projevy vnějších interakcí. O identifikaci látek ze spekter a z IČ databázi přednášela Ing. Novotná. Výklad byl doplněn informací o internetu (Ing. Machovič). Kvantitativní analýzu a použití chemometrie ve vibrační spektroskopii prezentoval Ing. Tenkl (Nicodom). O Ramanově spektroskopii referoval Doc. Strauch, Dr. Matějka demonstroval výukový program Spec Tool 2.1. Vibrační spektra ve stručném přehledu pak uvedl Doc. Strauch. V závěrečné přednášce Doc. Vlčková hovořila o souvislostech ve vibračních spektrech z dnešního pohledu poznatků.

Náročnou, značně namáhavou, nicméně významnou součástí programu byla v průběhu kurzu s přednáškami se prolínající interpretační cvičení v analýze spekter a přiřazování spektrálních pásů, vedená Doc. Strauchem a Dr. Hilgardem. Ve spolupráci Ing. Novotnou byl opět předveden názorný výukový interpretační program 15 spekter. Závěrečnou soutěž v interpretaci infračervených spekter připravila Ing. Novotná, jež také výsledky vyhodno-

tila. V soutěži bylo zadáno celkem 12 spekter. Nejúspěšnější řešitelé byli odměněni celkem šesti cenami, z nichž tři věnovala Spektroskopická společnost a tři firma Nicodom.

V anketě frekventantů byly vzneseny některé podněty pro příští kurzy, jako např. počáteční vzájemné seznámení účastníků kurzu (podobně jako v kurzu předchozím), požadavek více praktik, více informací o spektrech anorganických látek, zařazení kvantity v MIR aj. K některým bude jistě přihlédnuto, avšak rozšiřovat program o další cvičení je neúnosné v již tak náročném kurzu a dle názoru lektorů nelze tak učinit na úkor teoretických přednášek. Lze však provést některé změny ve sledu programu (zařazení výukových programů dříve - není to však jednoznačné).

Absolventi kurzů na základě své aktivní účasti obdrželi osvědčení o absolvování kurzu s tradičním hologramem Jana Marca Marci.

3. Iglar MS-TAGE

Vladimír Havlíček

Ve dnech 4. - 5. 2. 1999 proběhlo v nádherném prostředí rakouských Alp již 3. Iglar MS-TAGE. Tuto hmotnostně spektrometrickou konferenci pořádá ve dvouletých intervalech Katedra organické chemie z University of Innsbruck, v mezidobí jsou pak realizovány NMR konference. Na obě akce si pořadatelé zvou vždy kolem deseti hlavních přednášejících, kteří patří k světovým hvězdám oboru, ostatní účastníci mohou prezentovat pouze postery.

Letošní MS-TAGE bylo věnováno nejnovějším aplikacím hmotnostní spektrometrie v biochemii a molekulární biologii. Mezi přednášejícími dominovali zejména Prof. Donald Hunt z University of Virginia (Cell Antigens and Proteomics), Prof. Renato Zenobi z ETH Zurich (Noncovalent Complexes), Prof. John Yates III z University of Washington (MS Methods to Define Protein Functions), Prof. Alain van Dorsselaer z CNRS Strasbourg (Supramolecular Biological Assemblies). Analýze genetických mutací kombinovanými technikami pak byla věnována sdělení Prof. Michaela Linscheida (Humboldt University Berlin) a Prof. Paula Vourose (Northeastern University, Boston).

Z České republiky přijelo celkem deset účastníků, kteří prezentovali čtyři postery.

