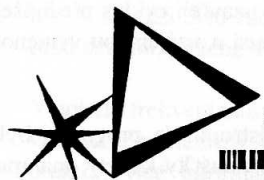


Spektroskopická společnost

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.

Nad Ostrovem 1119/7  
147 00 Praha 4  
tel. 02-61222164-7, fax 02-61222168

**Firma Perkin Elmer zajišťuje prodej a servis přístrojů v těchto oblastech:**

- ❖ spektroskopie (AAS, ICP-OES, ICP-MS, UV/VIS, FTIR, Fluorescence)
- ❖ termická analýza (DSC, DTA, TGA, DMA, DPA)
- ❖ plynová chromatografie (GC, GC-MS)
- ❖ polarimetrie
- ❖ kapalinová chromatografie (LC, LC/MS, LC/MS/MS)
- ❖ laboratorní informační systémy (LIMS)
- ❖ elementární analýza

**Firma Perkin Elmer představuje novinku ve svém výrobním programu  
FTIR spektrometr nové generace  
Spectrum ONE**

**Mezi hlavní přednosti tohoto přístroje patří:**

- „IR Assistant“ - software, díky kterému je obsluha snadná i pro úplného začátečníka
- „IR Expert“ - software, který Vám pomůže optimalizovat Vaše metody
- automaticky rozpozná a optimalizuje měřicí nástavce (ATR, difúzní reflektance)
- funkce „Look-Ahead“ - není potřeba provádět korekční měření pozadí před vlastním měřením vzorku
- zabudovaný dotykový display pro jednoduché ovládání
- „Absolute Virtual Instrument“ (AVI) - patentovaná technologie pro standardizaci dat - každý přístroj dává stejné výsledky, možnost přenosu kalibrací
- každý přístroj má svoji TCP/IP adresu - možnost řízení z libovolného počítače v lokální síti

**Názvoslovné dokumenty komise V/4 IUPAC**

*Ivan Rubeška*

Mezi konferenčními tiskovinami, které budou předány účastníkům 11. Spektroskopické konference v červnu letošního roku (příhláška byla vložena do minulého čísla Bulletinu), budou i následující české překlady názvoslovi IUPAC v oboru spektroskopie:

Part V	Zdroje záření
Part VII	Molekulová absorpční spektroskopie UV/VIS
Part VIII	Nomenklaturní systém pro rtg spektroskopii
Part IX	Přístroje pro spektrální disperzi a izolaci optického záření
Part X	Příprava materiálů pro analytickou atomovou spektroskopii
Part XI	Detektory záření
Part XII	Výrazy spojené s elektrotermickou atomizací
Part XIII	Výrazy spojené s chemickou generací par

Části VIII, X, XII a XIII jsou již dokončeny, na zbývajících dokumentech příslušní redaktoři pracují a je oprávněný předpoklad, že do termínu konference své dílo úspěšně dokončí. Rozdáním na konferenci bude české názvoslovi předloženo spektroskopické veřejnosti s výzvou k připomínkám.

Celý soubor dokončených názvoslovných dokumentů bude možno po konferenci zakoupit v sekretariátu Společnosti.

**Nadcházející konference**

**Deauville CONFERENCE 99 - 7th S.A.S (Symposium on Analytical Sciences)**  
Praha, 11. - 13. 10. 1999

*Info:* Deauville CONFERENCE 99 - 7th S.A.S., 7, rue d'argout, 75002 Paris, France;  
e-mail: admin@dc-ja.org;  
V. Kanický, V. Otruba, L. Trnková, PŘF MU, Brno, Kotlářská 2, 611 37 Brno;  
e-mail: viktork@chemi.muni.cz; otruba@chemi.muni.cz

**Toxicita a biodegradabilita látek a odpadů významných ve vodním prostředí**  
(9. konference organizovaná Aquachemie Ostrava a VÚ rybářským a hydrobiologickým Vodňany)

Horský hotel Biocel Soláň, Velké Karlovice – Karolinka, 13. -17. 09. 1999.

*Info:* Mgr. E. Maszjarová, Aquachemie, Varenská 49, 702 00 Ostrava 1.  
Tel.: 069-66 58312-313, fax: 069-66 12 702 e-mail: aquachemie@arsystem.cz

# 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



### GBC

- AA spektrometry
- UV-VIS spektrometry
- ICP OES spektrometry
- ICP-TOF-MS spektrometry
- HPLC sestavy

### Spectron - Optel

- XRF vlnově-disperzní rentgenfluorescenční spektrometry

### Berghof

- vysokotlaké rozklady vzorků
- teflonové nádoby a podvarová destilace
- laboratorní tlakové autoklávy

### Carbolite

- laboratorní inkubátory a sušárny
- laboratorní muflové pece
- trubkové pece (včetně rotačních a vakuových)

### Z-tek CPI

- spotřební materiál pro všechny typy AAS, ICP, AOX

### Photron

- spektrální zdroje - HCL, Suprelampy, D2E pro AAS

### Wilks Enterprise

- jednoúčelové spektrometry pro stanovení NEL
- rychlé stanovení obsahu sazí v olejích

### Spectrolab

- laboratorní, mobilní, procesní FTIR, FTNIR

### Vlastní produkce

### RMI

- TMA - termomechanické analyzátoary
- DMTA - dynamické termomechanické analyzátoary
- DTA - diferenční termická analýza
- zařízení pro termické testování uhlí dle ISO a ASTM
- laboratorní indukční tavičky
- zařízení pro indukční ohřev
- zařízení pro testování skla dle ISO a ASTM

**Intertec**  
s.r.o.

World Class



Analytical Equipments

# NOVÉ

## Nový AA spektrometr GBC Avanta Ultra Z

*Firma GBC přichází s novým AA spektrometrem se Zeemanovskou korekcí. Tento spektrometr v sobě zahrnuje zkušenosti ze všech doposud vyráběných systémů a zároveň přináší řadu nových řešení. Jeho základní charakteristiky jsou:*

- **Longitudální Zeemanův efekt**
- **Vysoká modulační frekvence** (plných 200 měření za sekundu, prodleva mezi impulzy pouze 1 ms) odstraňuje problémy s překorčováním.
- **Obdélníkový průběh magnetického pole**
- **Proměnná síla magnetického pole** umožňuje optimalizaci pro jednotlivé prvky a tím maximální hodnoty MSR a zvětšenou linearitu kalibrací.
- **Optický systém** (Ebertovo uspořádání) s dlouhou fokální vzdáleností montovaný v trojrozměrném odlitku ze slitiny Al/Mg zajišťuje velkou energetickou prostupnost a termickou stabilitu.
- **Kontinuálně stavitelná šířka spektrálního intervalu** od 0.2 do 2 nm
- **Magnety a elektrotermický atomizátor** jsou přímo integrovány do optické osy
- **Osmilapový karusel** s automatickou justací lampy a zabudovaným zdrojem pro čtyři Superlampy
- **Příčně uchycený elektrotermický atomizátor s vysokou rychlostí ohřevu**
- **GFTV - integrovaná kamera** zobrazuje po celou dobu analýzy stav v kyvetě.
- **Autosampler pro 150 vzorků a 10 velkoobjemových pozic pro předmíchané standardy a modifikátory.** Plná programovatelnost (možnost přisouzení vlastností Standard, Modifikátor, Blank, Sample Blank, Spike, Sample kterékoliv pozici autosampleru). Proměnná rychlost dávkování zajišťuje reprodukovatelné nadávkování při využití "Hot Injection" a při dávkování problematických vzorků a organických roztoků. Pozice raménka je řízena krokovými motory, což zaručuje reprodukovatelné a snadné nastavení přímo ze software. Pt dávkovací kapilára.
- **Software pro Windows 98 a Windows NT** zajišťuje velmi snadnou obsluhu, zároveň má již integrován modul pro zapojení do LIMS a sítě.

Pernštýnská 116, 533 41 Lázně Bohdaneč, tel. 040-92885, fax. 040-6921404,

**RMI**  
RESEARCH MEASUREMENT INSTRUMENTS

# NOVÉ

## WILKS ENTERPRISE

Jednouúčelové IR spektrometry kompaktní konstrukce známého výrobce z USA jsou určeny pro měření NEL v různých typech vzorků. Spektrometry se dodávají jak v provedení pro měření s kyvetami, tak s technikou ATR. Spektrometry je možné kalibrovat přímo v ppm nebo mg/l a vyznačují se velmi jednoduchou obsluhou. V případě vyšších nároků na QC/QA je spektrometr možné ovládat z prostředí Windows 95/98 nebo Windows 3.1x. Jednou z variant je také jednouúčelový spektrometr pro stanovení obsahu sazí v olejích. Spektrometr svým koncentračním rozsahem pokrývá jak oblast klasicky měřenou FTIR tak i TGA. Analýza je velmi rychlá a bez velkých nároků na obsluhu.

## SPECTROLAB Research Laboratories LTD

Robustní laboratorní, přenosné a procesní FTIR a FTNIR spektrometry s vynikajícím poměrem cena/výkon. Za cenu levného FTIR/FTNIR spektrometru získáte přístroj vědecké kategorie s vysokou rychlostí a přesností. Patentované optické uspořádání zajišťuje vysokou rychlost a přesnost zároveň s vysokou robustností a spolehlivostí. Spektrometry je tak možné používat od vědeckých pracovišť, přes studentské laboratoře až po procesní, mobilní nebo kontinuální aplikace.

## Komplexní řešení problematiky NIR analýzy

- instalace kvalifikace, operační kvalifikace, ověření funkčnosti přístroje (odpovídá filosofii a směrnici FDA)
- vývoj aplikace na míru, validace metody
- tvorba dokumentace (SOP, validační plán a validační report)
- vývoj algoritmů/software

Pernštýnská 116, 533 41 Lázně Bohdaneč, tel. 040-92885, fax. 040-6921404,

Spektroskopická společnost Jana Marci Marci

adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6

redakční rada: Dr. M. Fara (předseda), Dr. K. Jurek, Dr. J. Sysalová, Dr. B. Vlčková  
tech. redakce: P. Vampolová

redakční uzávěrka: únor 1999, uzávěrka příštího čísla: duben 1999