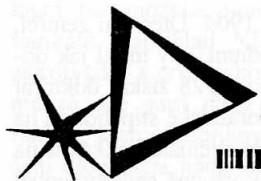


spektroskopická společnost
Jana Marci Marci 406
100 29 PRAHA 6, Thákurova 7



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCI MARCI

BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARCI MARCI

Číslo 98

duben 1999

Gerhard Herzberg 1904 - 1999



Profesor Gerhard Herzberg, nositel Nobelovy ceny za chemii za rok 1971 "za mimořádné příspěvky k lidskému poznání v oblasti elektronické struktury a geometrie molekul a radikálů" zemřel 3. března 1999 ve svém ottawském domě ve věku 94 let. Čest jeho památce.

Dr. Herzberg je považován za otce moderní spektroskopie. Byl vynikající pedagog, jeho přednášky byly odborně vynikající, srozumitelné, povznášející a především uměly nadchnout posluchače. Jeho mimořádná energie a schopnost udělat "svou vědu" krásnou, se naplno uplatnila v jeho monografiích. Kniha "Atomová spektra a atomová struktura" se znovu vydává po 62 (!) letech a jeho třídílná monografie "Molekulová spektra a molekulová struktura" z roku 1939 (a s reedicemi v letech 1946 a 1966) se stala skutečnou biblí tohoto vědního oboru.

Gerhard Herzberg se narodil na vánoce (25.12.) v Hamburku roku 1904. Otec mu zemřel, když mu bylo deset let, a mladý Gerhard se musel ucházet o stipendium, aby mohl jak dokončit střední školu, tak i studovat techniku v Darmstadtu, kde roku 1928 získal doktorát v "inženýrské fyzice". Šťastná náhoda mu umožnila získat postdoktorandské stipendium na universitě v Göttingenu, kde se právě vznikající kvantová mechanika začínala aplikovat na problémy atomů a molekul. Zde pracoval ve skupině Maxe Borna. Postupně spolupracoval na teoretických problémech s W. Heitlerem, v laboratoři pronikal do tajů spektroskopie pod vedením J. Franka a s F. Hundem se podílel na rozvoji teorie molekulových orbitalů. Následoval pobyt v Bristolu u profesora J. E. Lennarda-Jonese a návrat do Darmstadtu (1930), kde se už jako docent začal plně věnovat atomové a molekulové spektroskopii.

V roce 1933, po nástupu fašismu v Německu, začal Herzberg hledat místo v zahraničí především kvůli své ženě Luise, které jako Židovce hrozily nacistické perzekuce. Následující dva roky prožil v Londýně a v Zurichu, ale klíčové pozvání přišlo z Kanady, z university v Saskatchewan, kde dostal nabídku na pozici hostujícího profesora. Dr. Herzberg brzy prokázal své nadprůměrné kvality a záhy mu bylo nabídnuto trvalé místo profesora. V Saskatchewanu Herzberg prožil deset úspěšných let, napsal zde své slavné knihy a rozšířil svůj spektroskopický výzkum směrem k astrofyzice. V roce 1945 dokonce přechází na Yerkeskou observatoř University of Chicago, kde navazuje své dlouholeté přátelství se S. Chandrasekharem a poprvé realizuje květy s dlouhou optickou drahou, aby simuloval spektra planetárních atmosfér. Po třech letech dostává nabídku, aby vytvořil skupinu molekulární spektroskopie při Kanadské národní výzkumné radě (NRCC) v Ottawě. Tento úkol plní s entusiasmem sobě vlastním a brzy sestavuje špičkový tým, který se po dlouhá léta stává absolutní špičkou v oboru a skutečnou Mečkou molekulární spektroskopie a molekulární astrofyziky. Zde také zůstává až do konce své kariéry.

Psát přehled jeho sedmdesátileté vědecké práce je nesmírně obtížné, a tak jej uvedu jen v bodech. V oblasti atomové fyziky a atomové spektroskopie, vedle již zmíněné monografie, to byly práce zabývající se problematikou lambovských posunů a především spinů atomových jader. Není bez zajímavosti, že na základě střídání intenzit v Ramanově rotačním spektru molekuly dusíku Herzberg již v roce 1929 (tedy tři roky před objevem neutronu) dochází k závěru, že jádro dusíku musí mít celočíselný spin a podléhá Bose-Einsteinově statistice.

V oblasti molekulové spektroskopie je přehled jeho prací daleko bohatší a je obtížné postihnout všechny jeho vynikající výsledky. V roce 1933 publikuje práci (s E. Tellerem) o intenzitách vibronických přechodů, která vedla k formulaci Franck-Condonova principu. Velkým přínosem byly jeho práce z roku 1937, kdy délku vazeb dává do jasné souvislosti s typem okolních vazeb, stejně jako jeho práce vedoucí k určení disociačních energií diatomických molekul. Mezníkem se stává jeho identifikace tří neznámých čar v mimozemských mezihvězdných spektrech (1941), jejich přiřazení CH^+ kationtu a reprodukce tohoto spektra v laboratoři. V padesátých letech rozvinul techniku zábleskové fotolýzy,

kteřá mu umožnila pionýrské práce v oblasti krátce žijících molekulárních specií, zejména radikálů (například NH_2 , HCO , CH_3 , CH_2 , C_3 , BH_2 atd.), mající velký význam pro astrofyziku a organickou chemii. Čistě teoretické práce byly v jeho kariéře poměrně výjimečné, ale patří mezi ně například i půvabná studie o znaménku elektronické vlnové funkce, kterou publikoval s Ch. Longuet-Higginsem v roce 1963. Herzberg stál také u řešení dlouholeté hádanky difúzních mezihvězdných spektrálních pásů, u objevu uhlikatých řetězců v mezihvězdném médiu, první pozoroval spektrum H_3 a získal řadu dalších priorit. K jeho zásluhám lze řadit i dlouhou řadu vynikajících výsledků jeho ottawské skupiny, kterou s takovou láskou založil a s neutuchajícím nadšením vedl.

Uvádět odborná ocenění a čestná ocenění v případě nositele Nobelovy ceny významu profesora Herzberga mi připadá zcela zbytečné a jistě nepřekvapí, že je i laureátem medaile Jana Marka Marků z roku 1985.

Je třeba zmínit ještě jeho blízké a pozůstalé. Jeho první žena Luisa, která byla také vynikající spektroskopičkou, zemřela náhle v roce 1971 krátce před jeho oceněním Nobelovou cenou. Zůstala po něm jeho druhá žena Monika a jeho děti. Syn Paul je dnes profesorem psychologie na York University v Torontu a dcera Agnes profesorkou matematiky a statistiky na ontarijské Queen's University v Kingstonu. Mezi vzpomínající pozůstalé budou dlouhou dobu patřit i jeho kolegové a celosvětová spektroskopická rodina.

Štěpán Urban

CANAS '99

Colloquium Analytische Atomspektroskopie, Kostnice (Konstanz) SRN, 14.-19.3.1999.

Věra Spěváčková

Ve druhé polovině března se konalo pod záštitou firmy Bodenseewerk Perkin Elmer GmbH tradiční setkání odborníků atomové spektroskopie. Historické město, které je svázáno s českými dějinami, se stalo místem pro setkání více než tří stovek specialistů z 12 zemí Evropy i zámoří. Vzhledem k převažující většině účastníků z Německa, Švýcarska a Rakouska, jednacím jazykem byla převážně němčina, přednášky a příspěvky v angličtině se staly doménou účastníků z ostatních zemí. Z české republiky se kolokvia zúčastnilo celkem 6 pracovníků se dvěma přednáškami a třemi postery.

Vědecký program byl rozdělen do sekcí. První den kolokvia byl zaměřen na problematiku optické atomové spektrometrie (AAS, ICP-OES) kdy se ukázalo, že její metody jsou stále ještě aktuální. Program druhého dne se týkal možností stanovení chemických forem metodami atomové spektroskopie v návaznosti na separační metody, dále na předkoncentrační metody a na přípravu vzorků včetně rozkladů. Stanovení chemických forem ve spojení s metodami kapalínové a plynové chromatografie bylo předmětem studií zejména v oblasti

analýz biologických, klinických a nutričních materiálů. Výsledky těchto studií přinášejí nový pohled např. na toxikologické působení různých forem prvků na lidský organismus apod. Tématem třetího dne se stala metoda ICP-MS, která po dopoledních odborných přednáškách a posterové sekci pokračovala firemním odpolednem s neformálním večerním zakončením. Čtvrtý den kolokvia probíhal ve znamení životního prostředí, průmyslových aplikací a generování těžkých sloučenin s následným stanovením atomovou spektrometrií. Slavnostní zasedání posledního dne zakončily přednášky významných představitelů v oboru atomové spektrometrie Borise L'vova, Waltera Slavina a Jiřího Dědiny, jehož velmi pěkná přednáška ukázala na perspektivnost hydridové techniky. Poslední přednáška Hugo Ortnera byla věnována Bernhardu Welzovi, který se po dlouhodobé spolupráci s firmou Perkin Elmer s touto firmou loučí.

Kromě vědeckého programu měli účastníci kolokvia možnost i neformálních setkání, která jsou mnohdy velmi důležitá pro navázání nových kontaktů. Registrace účastníků kolokvia v historickém „Spitalkellerei“ i závěrečný banket v historické budově Koncilu umožnila všem přítomným i ochutnávku kvalitních vín z oblasti Bodamského jezera. Návštěva Husova muzea v Hussenstraße, ostrovů Reichenau a Mainau či nedalekého malebného Meersburgu byly osvěžujícími doplňky k vědeckému programu.

Škola hmotnostní spektrometrie

Dr. Vladimír Havlíček

Ve dnech 28. - 30.4.1999 proběhla v Mikrobiologickém ústavu AV ČR již 5. Škola hmotnostní spektrometrie, akce, kterou OS hmotnostní spektrometrie pořádá v tříletých intervalech. Školy se zúčastnilo více než sto frekventantů, kteří reprezentovali jak zkušené matadorské obory, tak i začínající uživatele. Velký zájem o tuto akci byl vyvolán především hvězdným obsazením hlavními lektory. Drtivou část Školy odpřednášeli RNDr. Vladimír Hanuš, CSc (Ústav fyzikální chemie AV ČR) a RNDr. Miroslav Ryska, CSc (Quinta Analytica, Praha). V rámci Školy byly prezentovány všechny základní druhy ionizace, analýzy a detekce iontů. Poslední den byl věnován příspěvkům dobrovolně se přihlásivším uživatelům, kteří byli pohřichu pouze čtyři. Celkově vysoká úroveň Školy byla ještě potvrzena během druhého dne jejího trvání, kdy předseda Akademie věd ČR Prof. Rudolf Zahradník slavnostně předal Dr. Vladimíru Hanušovi speciální číslo *European Mass Spectrometry*. Zvláštní číslo tohoto renomovaného zahraničního časopisu bylo vydáno u příležitosti 75. narozenin Dr. Hanuše.

Další plánovanou akcí odborné skupiny hmotnostní spektrometrie je

18th Informal Meeting on Mass Spectrometry,

kteří se bude konat v hotelu Pyramida, Bělohorská 24, Praha 6, a to ve dnech 30. dubna - 4. května 2000.

Jedná se o konferenci s velkou tradicí a mezinárodním renomé. Jako hlavní přednášející přijede mnoho žijících legend světové hmotnostní spektrometrie, mj. prof. F.W.McLafferty (Ithaca, NY), prof. N. M. M. Nibbering (Amsterdam), prof. G. Cooks (Purdue University, IN), prof. J. K. Terlouw (Hamilton), prof. F. Turecek (University of Washington, WA), prof. C. Fenselau (Baltimore, MD), prof. E. Gelpi (Barcelona), prof. M. Hackett (UW, Seattle) a celá řada dalších. Přednášky a poster budou samozřejmě vydány v příslušném sborníku a navíc na místě přijímány k publikaci v *J. Mass Spectrom.*, *Rapid Commun Mass Spectrom.* nebo *European Mass Spectrometry*. Předběžně se lze na tuto akci registrovat na adrese Spektroskopické společnosti JMM. Další informace lze také najít na internetu:

<http://www.biomed.cas.cz/~havlicek/18thimms.htm>.

CERM-2

Central European Conference on Reference Materials, Praha 9.-10. září 1999

V uvedených dnech se v Praze uskuteční druhá regionální konference k problematice referenčních materiálů. První konference CERM se uskutečnila v r. 1996 na Slovensku, dalšími pořadatelskými zeměmi ve dvouletém až tříletém intervalu budou Polsko, Maďarsko a Slovensko. Svým zařazením mezi celosvětovými akcemi (např. Biological and Environmental Reference Materials Symposia BERM, pořádaná střídavě v Evropě a v USA) tak středoevropské regionální konference vhodně doplní potřebu pracovních setkání při větším zaměření na situaci a potřeby v našem regionu.

Referenční materiály (RM) chemického složení jsou významnou součástí systému zajištění jakosti chemických měření v analytických laboratořích. Jejich význam při vývoji a validování analytických metod je rovněž nezastupitelný. Konference se bude zabývat těmito otázkami, ale také problematikou návaznosti, výpočtu nejistoty certifikované hodnoty atd.

Pořadatelé konference jsou Český metrologický institut a EURACHEM-ČR. Zájemci o podrobnější informace necht' se obrátí na adresu:

Ing. Jan Tichý
Český metrologický institut
Hyberská 8
110 00 Praha 1
Tel.: 02/2110-7208
Fax: 02/2110-7220
E-mail: Jtichy@cmi.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

PERKIN ELMER s.r.o.

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

11. SPEKTROSKOPICKÁ KONFERENCE

se bude konat v Praze ve dnech 28.-30. června 1999 a zahrne všechny oblasti spektroskopie atomové, molekulové i speciálních spektroskopických metod a jejich aplikace v praxi.

Členové Společnosti, kteří se dosud nepřihlásili, mohou svoji účast dohodnout ještě telefonicky v sekretariátu Společnosti (pí. Pavla Vampolová, tel./fax: 02-311 2343).

NABÍDKOVÁ A POPTÁVKOVÁ SLUŽBA ČLENŮ SPOLEČNOSTI

Ing. Ivo Dubský, CSc
U Háskových vil 13
466 02 Jablonec nad Nisou

nabízí k odprodeji :

1. SPEKOL 11, Zeiss, Jena, prakticky nepoužívaný, plně funkční.
2. SPECORD UV VIS, Zeiss, Jena, velmi zchovalý, po servisní prohlídce, plně funkční. K tomu nekompletní SPECORD UV VIS zdarma na náhradní díly.
3. Spektrofotometr VSU 2 (UV VIS), Zeiss, Jena, po servisní prohlídce, zcela funkční. V případě zájmu možnost nového napaření všech zrcadel. K tomu nekompletní VSU 2 (VIS) zdarma na náhradní díly.
4. Spektrofotometr VSU 1, Zeiss, Jena, zdarma.

Spektroskopická společnost Jana Marca 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: duben 1999, uzávěrka příštího čísla: červen 1999