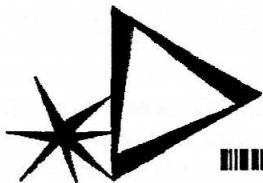


Spektroskopická společnost  
Jana Marka Marci  
166 29 Praha 6, Thákurova 7



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI

B U L L E T I N  
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI  
JANA MARKA MARCI

Číslo 102

duben 2000

Prof. Josef Plíva

S lílostí oznamujeme všem členům  
Spektroskopické společnosti  
Jana Marka Marci,

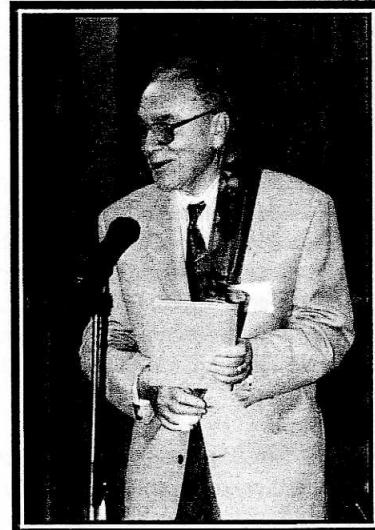
že ve čtvrtek 9. března roku 2000

zemřel skvělý spektroskopik, mimořádný  
pedagog, vynikající vědec, nádherný člověk,  
jedinečný přítel

a bývalý předseda naší Společnosti

**Profesor Dr. Ing. Josef Plíva, DrSc.**

Čest jeho památce.



### 3. ročník Soutěže o nejlepší studentskou vědeckou práci v oboru analytická chemie

*Viktor Kanický*

Ve dnech 1. a 2. února 2000 se na Katedře analytické chemie Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity v Brně setkali studenti chemie českých vysokých škol, aby v Soutěži o ceny firmy Merck prezentovali výsledky své vědecké práce v analytické chemii. Třetí ročník soutěže (za rok 2000) byl organizován Odbornou skupinou analytické chemie České společnosti chemické ve spolupráci se Spektroskopickou společností Jana Marka Marci. První ročník soutěže proběhl v roce 1998 na Katedře analytické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci a v roce 1999 se soutěž konala na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze u příležitosti stého jubilea profesora Čůty.

V letošním roce přijelo do Brna 18 studentů se 17 soutěžními pracemi. Soutěže se účastnili studenti z Ústavu analytické chemie Vysoké školy chemicko - technologické Praha, Katedry analytické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci, Katedry analytické chemie Fakulty chemicko - technologické Univerzity Pardubice, Katedry analytické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy, Katedry analytické chemie a zkušebnictví Fakulty metalurgie a materiálového inženýrství Vysoké školy báňské - Technické univerzity Ostrava, Katedry analytické chemie Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity v Brně a Katedry chemie Pedagogické fakulty Univerzity Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem.

Přednesené příspěvky měly vysokou úroveň z hlediska prezentace i diskuse se členy soutěžní poroty. Soutěžní práce pokrývaly různé oblasti analytické chemie a byly zde zastoupeny metody separační, spektroskopické i elektroanalytické. Práce byly tematicky zaměřeny na léčiva, potraviny, biologické a klinické materiály, vzorky životního prostředí, vývoj nových detektorů a chemometrii.

Kvalita nejlepších prací byla natolik vyrovnaná, že se porota rozhodla udělit jednu první cenu a čtyři třetí ceny. První cenu získala Renata Hušková z Univerzity Palackého, třetí cena byla udělena Aleši Gavendovi (UP Olomouc), Veronice Quaiserové (UK Praha), Martinu Semerádovi (MU Brno) a Martinu Valíkovi (VŠChT Praha). Finanční ocenění - Ceny firmy Merck - předal studentům zástupce firmy Merck Ing. Miroslav Strádal. Česká společnost chemická věnovala soutěžícím umístěným na 1. a 3. místě předplatné Chemických listů na rok 2000 a současně nabídla uveřejnění jejich soutěžních prací v tomto časopise.

Třetí ročník Soutěže o nejlepší studentskou vědeckou práci z oboru analytická chemie byl sponzorován Spektroskopickou společností Jana Marka Marci a firmou Merck. Na závěr prvního dne soutěže se uskutečnil v Univerzitním klubu Masarykovy univerzity společenský večer, jehož se zúčastnili soutěžící, organizátoři soutěže a členové odborné poroty. O úspěšný průběh soutěže se zasloužila odborná porota ve složení: Doc. RNDr. Ervin Kozubek, CSc. (FMMI VŠB-TU Ostrava), předseda poroty Jan Preisler, PhD. (PřF MU

Brno), Doc. RNDr. Juraj Ševčík, Dr. (PřF UP Olomouc), Ing. Jitka Šramková, CSc. (FChT Univerzita Pardubice), Doc. Ing. Radko Volf, CSc. (VŠChT Praha) a Doc. RNDr. Jiří Zima, CSc. (PřF UK Praha). Organizaci soutěže zajišťoval kolektiv pracovníků Katedry analytické chemie PřF MU v Brně: RNDr. Marta Farková, CSc., Doc. RNDr. Viktor Kanický, CSc., Pavla Koželouhová, Přemysl Lubal, PhD., Doc. RNDr. Vítězslav Otruba, CSc., RNDr. Jiří Pazourek, Dr. a Jan Preisler, PhD.

Dvoustránková resumé soutěžních prací lze nalézt na internetové stránce Katedry analytické chemie PřF MU: [www.chemi.muni.cz/~analytika](http://www.chemi.muni.cz/~analytika).

### Seminář odborné skupiny rentgenové spektrometrie

*Václav Macháček*

Seminář se konal ve dnech 3.-5.dubna v hotelu Technik v Lázních Bohdaneč. Program byl zaměřen především na použití rentgenfluorescenční analýzy (RFA) v různých oborech: při analýze drahých kovů (A. Filipová) a keramických surovin (A. Daňková) a dále v cementárnách (J. Korynta), v hutích (Š. Vinklerová) a v kriminalistické laboratoři (M. Černý). Přednášky byly doplněny příspěvkem J. Karhana Zkušenosti s aplikací přístroje s fokusovaným rentgenovým zářením.

Z teoretické oblasti byla uvedena přednáška M. Melouna o statistickém vyhodnocování dat se zřetelem na problémy kalibrace.

Dostatečný prostor byl věnován prezentaci firem vyrábějících rentgenové přístroje nebo doplňky k nim. Jako úvod k této problematice byla zařazena přednáška J. Žlábkové o moderním managementu. Při prezentaci se pak představily firmy: Linn, Spectro, Ramt, Philips, RMI, Oxford, Inolab, 2Theta a Anmat.

K aplikační problematice byla přednesena sdělení Možnosti použití RFA v oblasti tribotechniky (M. Pouzar, T. Černohorský, A. Krejčová) a Analýza vodních roztoků po zakoncentrování na modifikovaných filtračních papírech (T. Černohorský, M. Pouzar).

Celkový počet účastníků semináře byl 51 a na jeho závěr bylo usneseno, že se příští seminář bude konat za dva roky.

### Kurzy vibrační spektroskopie

*Bohuslav Strauch*

OS vibrační spektroskopie pořádala opět své dva tradiční týdenní kurzy v již obligátním čase, poslední týden v lednu a počátkem února. Kurzy se konaly v budově pražské Vysoké školy chemicko-technologické v prostorách Ústavu analytické chemie, kde jsou pro tako-

vou akci vskutku optimální podmínky, jak po stránce technické a přístrojového vybavení, tak i z důvodů personálně-organizačních, a to na spektrálním pracovišti centrálních laboratoří pod kuratelou předsedy naší Spektroskopické společnosti, prof. Karla Volky.

#### I. kurz "Měření infračervených spekter", 24.-28. ledna, 21 účastníků.

Kurz opět zahájil doc. Strauch, frekventantům byly rozdány materiály (základní typy spekter, tabulky používaných experimentálních metod, seznam spektroskopické literatury z oboru včetně ukázek a tzv. problémová spektra). Po základním úvodu o organizaci kurzu a stručné literární informaci se ujal slova dr. Hilgard v přednášce o základních pojmech a popisu spekter. Podle anketních připomínek z předchozích kurzů byl v pondělí odpoledne uspořádán tzv. "mixer", věnovaný vzájemnému seznámení účastníků kurzu a také vedoucích praktických cvičení. Potom byly utvořeny čtyři pracovní skupiny pro praktika se zámkem potenciálně obdobných zájmů a úrovni frekventantů. Následující dopoledne měl dr. Pásztor (Nicodom) přednášku o principech FTIR spektroskopie. Důležitou částí programu tohoto kurzu je tradičně informace o přípravě vzorků a standardně používaných technikách při měření infračervených spekter, kterou zajišťuje Ing. M. Novotná. Počítacové zpracování spekter a použití spektrálních knihoven opět obstarala kol. Novotná, která věnovala též speciální pozornost reflexním metodikám a spektrům v internetové síti. Blízkou infračervenou oblastí a postupy v kvantitativní analýze se zabýval Ing. Tenkl (Nicodom). Spojení FTIR spektroskopie s ostatními metodami (Raman, GC, LC, TGA atd.) se věnoval dr. Šíkola (Bruker), následovala kratší informace o infračerveném mikroskopu (dr. Dominák / Nicodom). O postavení a přínosu IČ spektroskopie vědě a praxi promluvil doc. Horák.

V závěrečný den přednášel doc. Strauch o nepravých pásech, chybách a problémových spektrech, podrobněji se zabýval literárními zdroji pro práci spektroskopisty a ve volné diskusi uváděl některé příklady a problémy z praxe.

Praktická cvičení proběhla ve čtyřech pracovních skupinách v úterý a ve čtvrtek odpoledne podle rozvrhu. Na programu byla metodika měření kapalin, plynů, kalibrace a měření tloušťky krypty, manipulace s optickým materiálem (dr. Janečková, Ing. Javůrková), spektra v pevné fázi s přípravou tablet a emulzí, problémy interakce (Mgr. F. Kesner), reflexní metody - ATR, DRIFT (dr. Pásztor), zpracování spekter, knihovny a Search prakticky zajišťoval dr. Matějka.

V závěru kurzu obdrželi účastníci na základě své aktivity a účasti osvědčení o absolvování kurzu, jež jim předal doc. Strauch. Vedení kurzu bylo plně spokojeno s disciplinou a opravdovým zájmem frekventantů, plynoucím zřejmě z jejich vlastní potřeby a snad též úrovňě kurzu.

#### II. kurz "Interpretace vibračních spekter", 31.1. - 4. 2., 21 účastníků.

Při zahájení tohoto kurzu obdrželi účastníci rozsáhlý interpretační materiál s tabulkami charakteristických frekvencí, modelovými spektry a příklady spekter. Doc. Strauch se

v úvodní přednášce věnoval teorii vibrací jednoduchých molekul, základním vibračním modům, jejich klasifikaci a spektrálním projevům. Dr. Hilgard se zabýval interpretačními aplikacemi charakteristických frekvencí u jednotlivých skupin organických látek, vlivy spřažení, vnitromolekulárními i vnějšími efekty a interakcemi. Dr. P. Matějka přednášel o identifikaci látek ze spektrálních knihoven, koordinaci s ostatními spektrálními metodami, demonstroval výukový program Spectool, databáze a knihovny spekter a informoval o spektrálních možnostech uživatelů Internetu. B. Strauch v přednáškách promluvil též o Ramanově spektroskopii a o vibračních spektrech anorganických látek. Doc. B. Vlčková uzavřela cyklus přednášek souvislostmi ve vibračních spektrech ze současného pohledu poznatků.

Náročnou, značně namáhavou, nicméně významnou součástí programu byla s přednáškami se průběžně prolínající interpretační cvičení v analýze spekter a přiřazování spektrálních pásů, vedená doc. Strauchem a dr. Hilgarem a skupinová praktika u počítačů ve výukových programech pod vedením dr. Matějký. Byl rovněž demonstrován názorný výukový program jednotlivých vibračních modů při interpretaci spekter 15 vybraných látek (PE TUTOR). Dr. Matějka spolu s dr. Janečkovou a Ing. Javůrkovou připravili interpretační soutěž - 12 spekter neznámých látek - na závěr. Soutěže se účastnilo vesměs s dobrými výsledky 19 frekventantů, nejlepších 6 bylo odměněno cenami, věnovanými jednak firmou NICODOM, jednak Spektroskopickou společností Jana Marka Marci. V soutěži zvítězil Petr Březina z Ostravy.

Soutěžící obdrželi spektra toluenu, anilinu, kyseliny benzoové, propionanu sodného, diethylmalonátu, isobutyronitrilu, 5-nonanonu, nonylaldehydu, kyseliny nonanové, 1,6-heptan-dien-4-olu, 2-jodpropanu, 1-hexenu.

V závěrečné anketě byla vzesena řada podnětů, zejména přání zvýšit rozsah interpretačních cvičení, což však nelze dle našeho názoru na úkor teoretických přednášek. Opět zazněl požadavek věnovat se též problematice kvantitativní analýzy v střední IČ oblasti. Jak to ale vše vyměstnat do jednoho týdne? Obecně byla s průběhem kurzů oboustranná spojenost, opět musíme zdůraznit nevšední píli a zájem frekventantů, kterým jsem předal v závěru osvědčení o absolvování kurzu. Chtěl bych též poděkovat všem učitelům kurzů, sekretářce naší Společnosti paní Vampolové a zejména školníkovi, tutorovi a pedelovi obou kurzů, kol. Pavlu Matějkovi.

## K jubileu Doc. RNDr. Bohuslava Straucha, CSc

Doc. Bohuslav Strauch (\*1929) je znám svojí rozsáhlou pedagogickou, vědeckou a vědecko-pedagogickou prací v oboru vibrační spektroskopie a v naší Společnosti jako dlouholetý obětavý funkcionář.

Doc. Straucha lze bez nadsázky označit za průkopníka Ramanovy spektroskopie v českých zemích. Již v r. 1960 uvedl doc. Strauch na katedře anorganické chemie Přírodovědecké fakulty UK do provozu první spektrograf pro měření Ramanových spekter. Jeho mezinárodně uznávaná vědecká práce byla zaměřena především na vibračně spektroskopické studium anorganických sloučenin, zejména komplexů přechodných kovů, a biologicky významných molekul. Neméně významné a velmi úspěšné bylo pedagogické působení doc. Straucha, z něhož lze vyzdvihnout zejména systematické úsilí o seznámení nejen studentů, ale i široké spektroskopické veřejnosti s moderními vibračně-spektroskopickými metodami a technikami. Z rozsáhlé činnosti B. Straucha v této oblasti připomeňme jeho pojednání "Laserová 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.

Obdobně byla a je motivována i činnost doc. Straucha v rámci Spektroskopické společnosti. Od roku 1977 působil jako vedoucí odborné skupiny vibrační spektroskopie a od r. 1978 organizuje a vede Kurz měření vibračních spekter, k němuž se od roku 1993 připojil Kurz interpretace vibračních spekter. Popularita těchto kurzů, měřená jak počtem účastníků, tak jejich zájemem, rok od roku vzrůstá.

Doc. Strauchovi přejeme mnoho úspěchů v jeho tvůrčí odborné i pedagogické práci a nadále pevně zdraví do dalších let.

*Karel Volka  
předseda Spektroskopické společnosti JMM*

## Příspěvky členům Společnosti

Předsednictvo hlavního výboru projednalo žádosti o podporu účasti členů Společnosti na konferencích se spektroskopickou tématikou a z došlých žádostí udělilo příspěvky následujícím členům:

Ing. Havlíčkovi, Doc. Hulinskému, Ing. Kolihové, Dr. Slovákoví, Ing. Tkadlecové a Dr. Matějkovi.

## Připravované akce

Kurz ICP spektrometrie

4.-7. 9. 2000, Katedra analytické chemie PřF MU, Brno

Spektroskopické metody v organické analýze životního prostředí

11.-14. 9. 2000, Pardubice

2. seminář o rastrovací tunelovací mikroskopii, spektroskopii a příbuzných technikách

25.-27. 9. 2000, hotel Technik, Lázně Bohdaneč

Seminář Kvalita analytických výsledků

2.-6. 10. 2000, hotel Karlík, Dobřichovice

Kurz AAS pro pokročilé

13.-15. 11. 2000, hotel Vltava, Řež u Prahy

Seminář Problémy hydridové techniky

15.-17. 11. 2000, hotel Vltava, Řež u Prahy.

## Upozornění

Při účetní kontrole bylo zjištěno, že některými kolektivními členy nebyly dosud uhrazeny členské příspěvky. Žádáme representanty v jednotlivých organizacích, aby si ověřili, zda mají členské příspěvky vypořádány. V případě nejasnosti se laskavě obraťte na sekretariát Společnosti. Uhrazení členských příspěvků je podmínkou pro využívání členských slev na akcích pořádaných Společností.

## NABÍDKOVÁ A POPTÁVKOVÁ SLUŽBA ČLENŮ SPOLEČNOSTI

### PedF UJEP v Ústí n. L.

- hledá informace o emisním spektrometu maďarské výroby **FLAMON B**, výrobce MOM Budapest (technický popis, pracovní manuál)
- a nabízí kyvety pro měření roztoků v oblasti IČ, hranoly a řadu náhradních dílů pro přístroj **UR 20**, Carl Zeiss, Jena

Kontakt: Doc. Dr. J. Rejnek, CSc., PedF UJEP, České mládeže 8, 400 96 Ústí n. L.

### NICODOM s.r.o.

nabízí v rámci burzy použitých přístrojů FTIR spektrometr Nicolet model 210, připojitelný k PC, rok výroby 1990, repasovaný, se zárukou, cena od 259 000,- Kč (podle konfigurace) do 336 000,- Kč (kompletně vybavené zařízení včetně PC).

Bližší informace na adresu uvedené v inzerátu Nicolet/Nicodom v tomto čísle.

# Nicolet

INSTRUMENTS OF DISCOVERY

SPECIALISTÉ V OBORECH

## FT-IR, FT-NIR, RAMAN

- infračervené spektrometry s Fourierovou transformací pro náročné aplikace i rutinní použití
- FT-NIR spektrometry, vláknová optika, různé typy sond, intergrační sféra, chemometrie
- příslušenství a spotřební materiál k IR a FTIR spektrometrům
- specializované databáze IR a NIR spekter
- rychlá kvantitativní analýza ropného znečištění včetně jeho identifikace, analýza olejů, multikomponentová analýza plynů
- modemové napojení na rozsáhlou databanku spekter
- infracervené a ramanské mikroskopy
- spojení FTIR se separačními metodami a TGA
- zakázkový vývoj analytických metod včetně programování
- bezplatné předvedení přístrojů zájemcům s možností měření vlastních vzorků, více než 130 zařízení instalováno v ČR a SR

### Kontaktní adresa:

NICODOM s.r.o., Hlavní 2727, 141 00 Praha 4, ČR  
tel.: +420-(0)2-767031, -72760432, -764997, fax: -766859  
e-mail : NICDOMIR@TERMINAL.CZ WEB: <http://www.nicolet.cz>

## MERCK

Zděbradská 72  
251 01 Říčany  
Tel. +0204-619211  
Fax +0204-619303,4,5,6  
<http://www.merck.cz>  
[merck@merck.cz](mailto:merck@merck.cz)

Dovozce instrumentální techniky pro oblast chromatografie, UV-VIS, AA a fluorescenční spektrofotometrie těchto výrobčů:

### HITACHI

HPLC, LC/MS, UV-VIS, AA, fluorescenční spektrofotometry  
Kompletní servis v oblasti HPLC, aplikační databáze, výukové programy, validace přístrojů, validace analytických metod, optimalizace analytických metod, konzultace a realizace projektů v oblasti preparativní chromatografie

### SPECTRONIC

UV-VIS spektrofotometry pro široké použití, návaznost na testy pro analytiku vod, jednoduché ovládání a výhodná cena

### VARIAN

Cary 50 - revoluční "high-speed" spektrofotometr se zábleskovou lampou umožňující použití v rutinní analýze až po náročné průmyslové aplikace - možnost propojení uživatelského rozhraní s řízením celé technologie, napojení na optická vlákna, biochemická měření v malých objemech atd.

### Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6  
redakční rada: Dr. Milan Fara (předseda), Doc. Viktor Kanický, Dr. Blanka Vlčková  
tech. redakce: Pavla Vampolová  
redakční uzávěrka: duben 2000, uzávěrka příštího čísla: červen 2000