



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCI MARCI

\*\*\*\*\*

Spektroskopická společnost

Jana Marci Marci

166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

## BULLETIN

SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI  
Jana Marci Marci

Číslo 73

březen 1994

Diskussionstagung und Workshop  
INTERPRETATION VON INFRAROT- UND RAMANSPEKTREN  
Drážďany, 14. - 16. března 1994

Ve dnech 14. až 16. března 1994 se konaly na Technické univerzitě v Drážďanech diskusní dny na téma "Interpretace infračervených a Ramanových spekter". Díky pozvání pořadatelů (Institut für Analytische Chemie der TU Dresden, Deutscher Arbeitskreis für Angewandte Spektroskopie - DASp GDCh) nabyly "diskusní dny" charakter "středoevropské konference" (vedle cca 100 účastníků z celého Německa, 2 účastníci z Francie, 2 z Maďarska, 3 z Chorvatska, po 1 z Holandska, Polska, Slovenska, Finska, Ruska a Slovinska a dále 6 z České republiky. Během třech dnů bylo předneseno 23 přednášek v 5 tematických okruzích (1/ korelace spekter a strukturních parametrů, 2/ tvorba, kvalita a aplikace databází, 3/ simulace spekter, 4/ databáze ve výuce a 5/ expertní systémy pro interpretaci spekter) a bylo prezentováno 39 obdobně zaměřených posterů. Z většiny příspěvků byla zřejmá převaha FTIR techniky. Lze též zaznamenat rozvoj NIR spektroskopie a renesanci Ramanovy spektroskopie (především v souvislosti s FT Ramanovou spektroskopií).

Jednoznačným trendem je "automatizace" strukturní analýzy a maximálním využitím výpočetní techniky včetně počítačových sítí (mezinárodní, národní a "in house" databáze, expertní systémy a simulační programy). Přesto však ze všech diskusí vyplynulo, že sebelepší "umělá inteligence" a expertní systémy (programy) nenahradí inteligenci a zkušenosti experta (člověka). Nicméně jsou tyto systémy vítanou pomůckou pro experty a lze je velmi dobře využít v kurzech a praktikách pro studenty chemie, a to v různé pokročilé formě od bakalářského studia až po doktorandské. Problémem, který byl v rámci závěrečného "workshopu" až překvapivě široce diskutován, je překonání bariéry vůči výpočetní technice, která se stále projevuje u studentů chemie. V tomto smyslu bylo komentováno zaměření "počítačové výuky" na praktické zvládnutí chemicky orientovaného softwaru, využití informačních sítí a provádění rešerší.

Na konferenci představilo několik firem nové přístrojové a především softwarové produkty : Analytik Jena (FTIR a FT Raman spektrometry firmy Nicolet, informační systémy - LIMS), Bruker (FTIR spektrometry, expertní systémy pro interpretaci spekter), Dilor (Ramanovy spektrometry, konfokální Ramanův mikroskop), ITRAINS (výukový software pro strukturní analýzu), Chemical Concepts (databáze a software pro interpretaci spekter), Molecular Design (software pro strukturní analýzu).

Na závěr je třeba zdůraznit, že diskusní dny probíhaly ve velmi příjemné atmosféře vzhledem k perfektnímu odbornému a organizačnímu zajištění, za což patří poděkování především Prof. Dr. R. Salzerovi (Institut für Analytische Chemie der TU Dresden).

Pavel Matějka  
Ústav analytické chemie VŠCHT Praha

#### Zpráva o semináři ANALÝZA ORGANICKÝCH LÁTEK V ŽIVOTNÍM PROSTŘEDÍ

Seminář byl organizován Spektroskopickou společností Jana Marca Marci a společností 2 THETA. Seminář se uskutečnil 7. - 10. března 1994 v Řece v hotelu Javor. Odbornými garanty celé akce byli Prof. Ing. Jaroslav Churáček, DrSc., Vysoká škola chemicko-technologická v Pardubicích a RNDr. Miroslav Ryska, CSc., Výzkumný ústav farmacie a biochemie, Praha. Po organizační stránce byl seminář zabezpečen společností 2 THETA na vysoké profesionální úrovni. Seminář byl zahájen v centrálních analytických laboratořích VŠB Ostrava. Po prohlídce laboratoří, mimochodem vybavených nejmodernější instrumentální technikou, byl zahájen vlastní odborný program semináře.

Po úvodním slovu prof. Churáčka následoval odborný program. Odeznělo 20 přednášek a zhruba 10 informačních sdělení zástupců firem, které se semináře zúčastnily. Součástí semináře byla i výstava přístrojové techniky spolu s ukázkami jejího praktického využití. Této části semináře se účastnilo 12 vystavovatelů, přičemž soubor vystavovaných přístrojů zahrnoval širokou oblast analytiky životního prostředí.

Z přednesených referátů byly nejvýznamnější referát dr. Rysky věnovaný různým technikám hmotnostní spektrometrie a jejich využití v analytice životního prostředí, dále to byly přednášky doc. Melouna, doc. Hajšlové a dr. Pokorného, které byly věnovány využití statistických metod při zpracování analytických výsledků a jejich významu pro hodnocení správnosti a spolehlivosti analytických výsledků.

Ostatní přednášející měli referáty řešící konkrétní problematiku a prezentaci získaných analytických výsledků. Dvě přednášky Ing. Ventury a Ing. Morávkové byly zaměřeny na metodiku získávání výsledků spíše než na prezentaci analytických dat.

Ke všem referátům byla poměrně živá diskuse, a to jak k metodice, tak i k prezentaci dosažených výsledků. V řadě případů diskuse pokračovala i mimo přednáškovou síň zvláště u referátů, které se zabývaly přípravou vhodných standardů a technikou odběru vzorků.

Krátká sdělení zástupců firem byla na dobré technické úrovni a informovala účastníky o novinkách v přístrojové technice.

Dr. Vladislav Kubelka, CSc.  
VŠCHT Praha

#### INFORMACE O 7. KONFERENCI ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE Pardubice, 30. 8. - 2. 9. 1994

Upozorňujeme, že v rámci konference se budou konat tři tematicky zaměřená zasedání uvedená níže :

"Reference materials and quality assurance"  
(referenční materiály a zabezpečování jakosti)  
zasedání organizované komisí pro referenční materiály Spektroskopické společnosti JMM  
odpovědný za program Ing. J. Kučera, Český ekologický ústav, laboratoř NAA, 250 68 Řež u Prahy

"Atomic spectrometry in environmental analysis"  
(atomová spektrometrie v environmentální analytice)  
odpovědný za program Ing. T. Černožský, Universita Pardubice, katedra ochrany životního prostředí, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice

"Generation of volatile compounds in atomic spectrometry"  
(tvorba těkavých sloučenin pro atomovou spektrometrii)  
mikrosymposium sponzorované firmou Perkin-Elmer,  
odpovědný za program Dr. J. Dědina, Ústav analytické chemie AV ČR, laboratoř analytiky stopových prvků, Vídeňská 1083, 142 00 Praha 4.

Zájemci o účast na konferenci se mohou přihlásit na adresu sekretariátu Společnosti písemně nebo telefonicky či faxem na č. 02-311 23 43 s uvedením názvu případné přednášky nebo posteru.

Na zasedáních organizovaných komisemi jsou vítány i práce aplikačního rázu přednesené v češtině.

