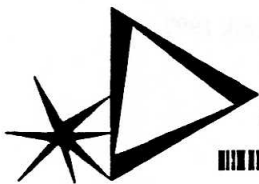


Spektroskopická společnost

Jana Marca Marci

166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

397



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARCA MARCI

Číslo 92

únor 1998

Kurz praktické AAS

Dle plánu odborných akcí Společnosti uskuteční se kurz praktické AAS od 9. do 12. listopadu 1998 v Karlíku u Prahy. Kurz je určen především začínajícím pracovníkům v oboru nebo pracovníkům, kteří byli dosud zaměřeni na úzké využití metody AAS a rádi by své znalosti rozšířili o další možnosti. Lektorský tým kurzu vede Dr. Jiřina Sysalová, CSc.

Mezi hlavní témata kurzu byly zařazeny základy optické spektroskopie, přehled přístrojové techniky, metody správného měření a vyhodnocování výsledků a jejich zpracování.

Formou přednášek bude podrobně probána plamenová technika, grafitová kyveta a hydridová technika, k čemuž budou uvedeny i možné nabídky současného trhu. Podrobně budou vyloženy otázky vývoje metod, výskytu a třídění rušivých vlivů a možnosti jejich eliminace a budou diskutovány praktické příklady.

Internátní organizace kurzu vytvoří časový prostor pro diskuse k probraným tématům a praktickým problémům, včetně verifikace a validace metod. Frekventantům kurzu bude k dispozici příslušná literatura. Pro zájemce bude zajištěna autobusová doprava z Prahy.

Předpokládaná cena kurzu:

1 100,- Kč organizační náklady pro kolektivní členy Společnosti

1 430,- Kč organizační náklady pro individuální členy a nečleny Společnosti.

Ubytování 300,- až 400,- Kč za osobu ve dvoulůžkových pokojích.

Příhláška je přiložena v tomto čísle Bulletinu. Přihlášení zájemci obdrží podrobnější informace do konce srpna, úhradu zaslanou složenkou pak bude třeba provést do konce září.

KATEGORIE A (diplomové práce)

Kateřina Chmelová:

Vibrační stavy složek nukleových kyselin v pevné fázi

Vedoucí diplomové práce : RNDr. Josef Štěpánek, CSc

Pracoviště : Oddělení fyziky organických struktur, Fyzikální ústav MFF UK

Diplomová práce se týká polarizovaného Ramanova rozptylu na monokrystalech modifikovaných bází nukleových kyselin a jejich komplexů, které představují unikátní modelové systémy pro nalezení vztahů mezi charakteristikami Ramanova spektra a parametry popisujícími prostorové uspořádání a mezimolekulové interakce v nukleových kyselinách. Plné využití technik polarizačních měření, která umožňují určit všechny složky veličin charakterizujících vlastnosti studované molekuly, je však podmíněno dostatečnou velikostí, dobrou optickou kvalitou a v neposlední řadě vhodným hábitem krystalu.

Krystaly s opticky kvalitními plochami typu (h01) byly využity pro studium vibračních módů smíšeného krystalu obsahujícího komplex 9-methyladeninu a 1-methylthyminu, který se vyznačuje atypickým párováním Hoogsteenova typu. Byla měřena polarizovaná spektra Ramanova rozptylu při třech různých polohách krystalu. V práci byly odvozeny vztahy, na jejichž základě byly ze spekter určeny kvadráty všech složek Ramanova tenzoru molekulárního komplexu. Tato data budou konfrontována s výsledky ab-initio kvantové chemických výpočtů, které povedou k určení škálových vnitromolekulárních silových konstant.

Z naměřených polarizovaných spekter byly získány údaje nejen o vibračních frekvencích, ale i o geometrii vibračních módů, zejména byly jednoznačně rozlišeny pásy rovinných a nerovinných vibrací. Díky porovnání s výsledky měření na dalších typech krystalů obsahujících pouze jednotlivé složky Hoogsteenova páru, tj. samotný 9-methyladenin nebo 1-methylthymin, bylo určeno, které vibrační módy jsou citlivé na vznik heteropáru. Bylo nalezeno několik vibračních módů, u kterých dochází k signifikantnímu posunu frekvence.

Nejzajímavějším zjištěním je však to, že zřejmě dochází ke spřažení frekvenčně blízkých vibračních módů adeninu a thyminu. Tento jev se projevuje výraznou změnou Ramanova spektra, která se zdá být zcela specifická pro vznik daného páru a tedy nezaměnitelná s tvorbou jiných typů vodíkových můstků (například mezi bází a vodou). Tyto poznatky přinášejí nové podněty pro hledání ramanovských markerů, které by měly sloužit pro identifikaci jednotlivých typů vodíkových můstků mezi bázemi nukleových kyselin v roztocích (například při studiu dvojšroubovicových a trojšroubovicových struktur nukleových kyselin).

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
- analyzátoři 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

