

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



pragolab

Thermo
SCIENTIFIC



Agilent Technologies

Authorized Distributor



Generálními sponzory Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci jsou firma ThermoFisher Scientific s.r.o. spolu s partnery Pragolab s.r.o. a Nicolet CZ s.r.o. a firma Agilent Technologies Inc. zastoupená autorizovaným distributorem HPST, s.r.o.

BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARKA MARCI

174

únor 2017

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz

telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

P.F. 2017

Redakční rada Bulletinu přeje všem členům Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci do nového roku hodně štěstí, zdraví a úspěchů v práci i v osobním životě. Předem děkujeme za Vaše příspěvky a upozornění na zajímavé akce u nás i v zahraničí.

101. schůze hlavního výboru Společnosti

Viktor Kanický

Dne 2. prosince 2016 se konala 101. schůze hlavního výboru naší Společnosti. Snad poprvé se uskutečnila v Brně, a to v areálu Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity na ulici Kotlářská. Program

schůze zahrnoval zprávu o hospodaření za 1. až 3. čtvrtletí 2016, plán odborných akcí na rok 2017 (viz [www stránky Společnosti](http://www.spektroskopie.cz)), kooptaci doc. RNDr. Radovana Fialy, CSc. ze Středoevropského technologického institutu (CEITEC) Masarykovy univerzity (<http://is.muni.cz/osoba/564>) jakožto vedoucího odborné skupiny NMR do HV za odstupujícího Ing. Jiřího Bruse, Dr., a dále kooptaci RNDr. Jakuba Hraníčka, Ph.D. z PřF UK Praha do revizní komise za zesnulého doc. Petra Rychlovského.

Hospodaření za první tři kvartály skončilo s mírným přebytkem, rovněž odborné akce v roce 2016 nebyly ztrátové. Sponzorem letošní soutěže (2017) o Cenu Petra Sedmery je firma Analytika, spol. s r.o. Bylo schváleno místo a termín konání 16. Česko-slovenské spektroskopické konference. Na základě dobrých

zkušeností získaných na 17. Škole hmotnostní spektrometrie byl vybrán pro spektroskopickou konferenci hotel Harmonie v Luhačovicích, přičemž konference se uskuteční koncem května 2018.

Nejdůležitějším bodem programu brněnského setkání byla Soutěž mladých spektroskopiků. Do soutěže bylo přihlášeno 8 prací v kategorii A a 9 prací v kategorii B. Průběhu soutěže a výsledkům je věnován samostatný příspěvek v Bulletinu.

Zemřel Doc. RNDr. Petr Rychlovský, CSc.
(18. 6. 1963 – 16. 10. 2016)

Václav Červený



16. října 2016 zemřel ve věku 53 let náš kolega a kamarád Petr Rychlovský, vedoucí týmu spektrometrických analytických metod katedry analytické chemie

Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy a člen Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci. S obavami jsme v posledních letech sledovali jeho zdravotní problémy, ale všechny nás zaskočil jeho náhlý odchod z tohoto světa.

Rodák z Jilemnice v letech 1981-1986 vystudoval analytickou chemii na katedře analytické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy. Na stejném pracovišti absolvoval v roce 1990 doktorské studium se zaměřením na spektrální analytické metody a jako zaměstnanec mu (s výjimkou stáže ve Vídni) zůstal věrný až do konce života. Několik let také zastával funkci tajemníka této katedry.

V rámci výzkumné činnosti se doc. Petr Rychlovský nejprve věnoval klasické UV/VIS spektrometrii. Po studiích analyticky využívaných organických barviv (komplexů s kovy a interakce s povrchově aktivními látkami, tenzidy) se v rámci evropského programu COST společně s doc. RNDr. Irenou Němcovou, CSc. věnoval studiu nově syntetizovaných potenciálních léčiv. Jeho velkým přínosem bylo, že na pracovišti zavedl průtokovou (FIA) a sekvenční injekční analýzu (SIA). Konstruoval a zároveň programoval složité manuálně nebo počítačem ovládané aparatury dle vlastních návrhů. Až teprve v posledních letech si dopřál

komerční zařízení k těmto technikám, přičemž se ukázalo, že jedinou předností takového zařízení je uživatelsky přívětivější ovládání.

Od počátku 90. let se také v rámci jednoho z prvních grantů Ministerstva školství pro PřF UK spolupodílel s doc. RNDr. Ludmilou Čermákovou, CSc. na vybudování laboratoře pro atomovou absorpční spektrometrii. V této oblasti věnoval stále větší pozornost otázkám separace analytu od rušící matrice vzorku. Toto téma jeho disertační práce se pak stalo základem pro obsáhlejší výzkum zaměřený na chemické a zejména na elektrochemické generování těkavých sloučenin nebo par analytu pro spektrální analytické metody v rámci práce habilitační, kterou obhájil v roce 2004. V posledních několika málo letech obracel spolu se svými kolegy svou pozornost k tzv. fotochemickému generování těkavých sloučenin nebo par analytu, které se zdá být výhodnějším pro speciální analýzu hydridotvorných prvků a rtuti pomocí AAS a AFS. Neméně zajímavou podkapitolou tohoto přístupu byl in-situ záchyt (prekoncentrace) prvků tvořících těkavé sloučeniny v grafitové kyvetě, k čemuž originálně modifikoval dávkovací rameno autosampleru GF90 (Unicam 939) křemennou kapilárou a rovněž vytvořil a upravil dodnes používané externí ovládání tohoto zařízení. Velmi si přál pracovat i s ICP-MS, ale byl nadšený i z nedávno do laboratoře pořízeného atomového fluorescenčního spektrometru a AAS s kontinuálním zdrojem a vysokou rozlišovací schopností. Výsledky svého výzkumu publikoval v českých i zahraničních impaktovaných časopisech.

Neméně důležitý byl také značný podíl doc. Petra Rychlovského na výuce studentů PřF UK v rámci bakalářského, magisterského i doktorského studia v oborech Chemie, Analytická chemie, Klinická a toxikologická analýza a Geochemie. Organizoval odborný seminář, byl garantem povinných i výběrových přednášek a autorem několika úloh do pokročilých praktik z analytické chemie, resp. Spektrometrických metod. Dovedl mnoho desítek svých studentů k úspěšným obhajobám jejich bakalářských, magisterských a doktorských prací. Byl spoluautorem vysokoškolských učebnic a úspěšným vedoucím, řešitelem nebo spoluřešitelem grantových projektů GA UK, FRVŠ, GAAV a GAČR.

Profesně byl doc. Petr Rychlovský aktivní i ve Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci, v posledních letech jako člen revizní komise. Spolupracoval také s kolegy a kolegyněmi nejen z PřF UK, ale i z Ústavu analytické chemie AV ČR, v.v.i., VŠCHT, Masarykovy univerzity a ČZU.

Ve svém volném čase Petr miloval pobyt na chalupě v Jizerských horách, stavění modelů lodí, ale také cestování a fotografování. Velice miloval svou ženu, se kterou ho kamarádi seznámili možná až příliš pozdě. Rád poslouchal hudbu a s nadšením a výborně vařil. A s nemenší chutí ty své dobrůtky též jedl. Tedy pouze v případě, že jsme mu je dříve nesnědli my, kterým je ve své dobrotě nabídl. Pro svoji spolehlivost, ochotu vždy každému pomoci, skromnost a laskavou povahu byl velmi ceněn svými kolegy i studenty. Byl to člověk s velkým srdcem, které jej po krátké nemoci v rozhodující chvíli zradilo. Chybí nám a rádi na něj vzpomínáme. Čest jeho památce!

RNDr. Stanislav Hilgard, CSc.
(* 17. 8. 1943, + 26. 10. 2016)

Bohuslav Strauch



Koncem letošního října odešla do nenávratna osobnost, která se valnou část svého života zabývala

spektroskopií a je záhodno říci o něm spektroskopické obci něco podrobnějšího.

Standu jsem poznal jako gymnaziálního studenta, když jsem si zvyšoval svou pedagogickou kvalifikaci pro výuku chemie formou náslechnů v tehdejší SVVŠ Ladislava Hanuse v Nuslích, kousek nad divadlem Na Fidlovačce v Praze 4. On se od svých spolužáků svými znalostmi dost nápadně lišil včetně vystupování, což mne okamžitě jako mladého učitele zaujalo. Jeho další cesta byla jasná, studium chemie na Přírodovědecké fakultě Karlovy univerzity, kde opět patřil v ročníku mezi nejlepší. Zvolil si specializaci analytická chemie. Po úspěšném ukončení studia se stal vědeckotechnickým pracovníkem katedry organické chemie mateřské fakulty. Jeho úkolem bylo měření UV, VIS, ale zejména **infračervených spekter**. Myslím, že spolupráce s Dr. Milanem Horákem, vědeckým pracovníkem tehdejšího Ústavu fyzikální chemie ČSAV, začala již během studií a samozřejmě se prohloubila ve vlastní profesi. Milan Horák jako externí učitel katedry organické chemie byl také zadavatelem problematiky Standovy externí aspirantury. Oba zároveň spolupracovali na

přednáškách a cvičeních z fyzikálních metod v organické chemii, zejména pak v molekulové spektroskopii – v oblasti infračervených spekter. Podíl Standy na výzkumu i v pedagogickém vzdělávání postupně významně rostl.

Když jsme v 70. letech začali realizovat ve spolupráci s Čs. spektroskopickou společností postgraduální kurzy v měření vibračních spekter, Standa Hilgard patřil od počátku k zakládajícím pracovníkům kurzů. Standa dlouhodobě tyto kurzy zahajoval úvodní přednáškou o základních pojmech ve spektroskopii a zároveň vedl praktická cvičení v měření infračervených spekter zejména plynů a kapalin i s aspektem kvantitativní analýzy. Protože v průběhu dlouholeté experimentální praxe se setkal s řadou přístrojů od původně nedokonalých až k nejmodernějším aparátům, byly jeho zkušenosti rozsáhlé a unikátní, takže jeho rady byly neocenitelné.

Koncem 80. let jsme pravidelné postgraduální kurzy vibrační spektroskopie rozšířili o samostatný celek interpretace spekter. Standa měl jednak přednášky z aplikace v organické chemii, vypracoval rozsáhlou pomůcku pro interpretační cvičení na organických látkách. Jeho přednášky a stejně tak poměrně rozsáhlá interpretační cvičení, jež dlouhodobě vedl - donedávna – byly významným přínosem pověstných kurzů a jeho svědomité, precizní prezentace a pedagogické působení byly u frekventantů oblíbené a vždy vysoce hodnoceny. Jeho hluboké znalosti v oboru se výrazně projevovaly i při vyhodnocování našich tradičních soutěží.

Standa se výrazně zapsal svým působením do znalostí a zvyšování kvalifikace stovek frekventantů, kteří prošli našimi kurzy po desítky let.

Jeho fundované, přitom taktí a noblesní vysoce kvalifikované vzdělavatelské účinkování je nezapomenutelné a bude spektroskopické obci chybět.

TraceSpec 2016

Karel Marschner

15. ročník konference „Workshop on Progress in Trace Metal Speciation for Environmental Analytical Chemistry“ (TraceSpec), kterou zaštiťuje Mezinárodní asociace environmentální analytické chemie, byla pořádána v polském Gdaňsku. Konferenci hostila ve dnech 4. až 7. září 2016 místní technická univerzita. Konference se účastnilo 130

odborníků z 26 zemí (z toho 6 účastníků z České republiky). Čtyřdenní program obsahoval na 59 přednášek a posterovou sekci se 48 plakátovými sděleními.

Konference byla zahájena profesorem Nicolou Pirronem s přednáškou *“The strategic importance of having robust and innovative methods and technologies for environmental observations to support the implementation of policy”*, který zdůraznil potřebu globálního měřicího systému persistentních polutantů. Další přednášky pak do tematických celků nespojovaly ani tak použité spektrometrické techniky jako spíš problematika, která byla rozdělena do 10 tematických celků (metody prvkové analýzy koloidů a nanočástic, speciální analýza v biologických matricích, ultrastopová elementární analýza, a další). Osobně mě zaujala přednáška prof. Jörga Feldmana *„Arsenic speciation in mammalian tissues becomes more complex than ever”*, která se zabývala speciální analýzou sloučenin arsenu ve tkáních velryb. Kompletní program konference včetně abstraktů je možné nalézt na <http://chem.pg.edu.pl/tracespec/programme>.



Fotografie účastníků konference před budovou univerzity.

Druhý a třetí večer konference sloužily k neformálním setkáním účastníků. Nejprve v kostele sv. Jana při poslechu koncertu *„Symfonia Nordica”* v podání akademického sboru gdaňské univerzity. A další večer byl ve znamení *Get Together Party*, která posloužila i k vyhlášení cen pro mladé vědce. Cenu za nejlepší krátké sdělení získala Kelly LeBlanc (Trent University, Kanada) za přednášku s názvem *„Separating the operationally-defined fraction: discrete organic selenium speciation in high ionic strength environmental samples”* a ocenění za postery získali María Carmen Barciela-Alonso (University of Santiago de Compostela, Španělsko) za příspěvek *„Separation and determination of TiO₂ nanoparticles in water by cloud point extraction and ICP-MS”*, David Clases (University of Münster,

Německo) za příspěvek *„Isobaric dilution analysis as a new tool for speciation and ultra trace analysis of ⁹⁹Tc”* a Magdalena Michalska-Kacymirow (University of Warsaw, Polsko) za příspěvek *„Influence of cultivation conditions on biotransformation of selenium in onion (*Allium cepa* L.)”*.

Příští TraceSpec bude hostit profesorka Montserrat Filella ve švýcarské Ženevě v roce 2018.

20th International Conference on Flow Injection Analysis and Related Techniques (20th ICFIA) – Palma de Mallorca, Španělsko

Jakub Hraniček

První říjnový týden roku 2016, od neděle 2. do pátku 7., se konal 20. ročník mezinárodní konference o průtokové analýze. Oficiální název zní *„International Conference on Flow Injection Analysis and Related Techniques”* (ICFIA). Toto mezinárodní setkání proběhlo ve španělském přístavním městě Palma de Mallorca, hlavním městě autonomního společenství Baleáry, ležícím na největším španělském ostrově Mallorca. V Palmě se nachází jedno z nejméně navštěvovaných španělských letišť, nabízející účastníkům konference pohodlný způsob dopravy z většiny evropských i mimoevropských zemí. Letiště rozděluje Palmu na dvě pomyslné části, severozápadně od letiště se nachází historická část města, jižně pak rekreační hotelová oblast (Playa de Palma), v níž se nacházel i z letiště městskou hromadnou dopravou snadno dostupný hotel Barceló Pueblo Park, hostící tuto konferenci. Konference byla pořádána za podpory mnoha sponzorů domácími i zahraničními institucemi (*„University of the Balearic Islands (UIB)”*, *„Association of Environmental Sciences and Techniques (AEST)”* a v neposlední řadě též *„Japanese Association for Flow Injection Analysis (JAFIA)”*). Konference se zúčastnilo necelých 145 účastníků z celkem 19 zemí.



Společná fotografie účastníků konference, v pozadí centrální část Palmy

Konference byla zahájena v neděli v podvečer uvítacím večírkem v zahradě konferenčního hotelu. Všechny přítomné účastníky uvítal úvodním slovem prof. Víctor Cerdà, předseda tohoto ročníku konference. Po úvodní řeči následovalo lehké občerstvení, které v kombinaci s jasným počasím a teplotami kolem 23 stupňů vytvářelo příjemnou předkonferenční atmosféru. Odborný program se rozjel naplno hned druhý den ráno v klimatizovaném konferenčním sále hotelu. Na úvod zaznělo několika zvaných přednášek. V průběhu konference bylo prosloveno téměř 75 přednášek a bylo prezentováno necelých devět desítek příspěvků formou plakátových sdělení. Stěžejními tématy konference byly samozřejmě průtokové metody analýzy, a to především průtoková injekční analýza (FIA) a sekvenční injekční analýza (SIA) a jejich různé modifikace, teorie i mnohostranné praktické aplikace s využitím nejrůznějších detekčních technik. Nechyběly samozřejmě ani přednášky tematicky provázané s farmaceutickou analýzou, ochranou přírody a zdravím člověka, metrologií, separačními technikami a mnoha dalšími. O skutečném všestranném uplatnění technik průtokové analýzy svědčilo i velké množství plakátových sdělení.



Zahájení konference zástupci pořadajících organizací

Volný čas využili mnozí účastníci konference k odpočinku na pláži spojeném s osvěžením v Baleárském moři. Ti aktivnější mohli navštívit blízké mořské akvárium nebo si půjčit kolo a zamířit do nedalekého centra Palmy. V rámci konference se bylo možné zúčastnit organizovaného výletu do několika zajímavých míst tohoto 110 km dlouhého a mezi 60 a 90 km širokého ostrova. Po necelé hodině cesty zájezdovým autobusem se účastníci ocitli v malebné a turisticky vyhlášené vesničce Valldemossa s klášterem ze 14. století. Cesta dále pokračovala do malé pobřežní vesnice Deia s idylickým okolím olivových hájů, útočištěm slavných spisovatelů a hudebníků, s nádherným výhledem na moře ze strmých kopců. Závěr výletu se nesl v podobě dobrého jídla, pití a klidné odpolední siesty v prosluněné zátocě městečka Sóller.



Zátoka města Sóller

Předposlední večer konference patřil tradičně společenské večeři. Ta se tentokrát uskutečnila v restauraci Bahia Mediterraneo in the Paseo Maritimo nacházející se na jedné z největších přímořských promenád v Palmě. Na konferenci byla vyhlášena a předána řada ocenění. Předány byly ceny za dlouhodobé významné počiny v oblasti průtokových metod, uděleny byly cestovní granty mladým účastníkům konference a vyhlášeny byly nejlepší plakátová sdělení a ústní prezentace.



Laureáti CASSS travel grants pro tuto konferenci

Následující 21. ročník mezinárodní konference o průtokové analýze (ICFIA 2017) nás zavede do druhého největšího ruského města - Sankt Petěrburgu. Řadu užitečných informací o této konferenci, která se uskuteční v termínu od 3. do 8. září 2017, lze nalézt na již spuštěných webových stránkách <http://www.icfia2017.org>.

V případě zájmu je možné nahlédnout do programu 20. konference ICFIA 2016 včetně abstraktů u J. Hraníčka (jakub.hranicek@natur.cuni.cz).
Fotografie převzaty a upraveny z www.icfia2016.org.

XXI. Slovensko-česká spektroskopická konference

Viktor Kanický

Pátá, tedy již „jubilejní“ společná konference Slovenské spektroskopické společnosti a Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci se uskutečnila v lehce deštivém podzimním termínu (16. - 20. 10. 2016), tentokrát v malebné historické obci Liptovský Ján ležící nedaleko Liptovského Mikuláše

na úpatí Nízkých Tater. Spektroskopické bienále 2016 (předcházející: 2008 Častá-Papiernička, 2010 Litomyšl, 2012 Tatranská Lomnice, 2014 Praha) bylo věnováno památce profesora Mikuláše Mathernyho (†2015), vynikající osobnosti slovenské chemické komunity a mezinárodně uznávaného vědce, analytického chemika a odborníka v oblasti analytické spektroskopie. Vědecké symposium s mezinárodní účastí (SK, CZ, DE, HU, PL, AT) bylo příležitostí pro setkání přibližně 120 analytických spektrochemiků v pohodlném hotelu SOREA Máj. Třetina účastníků reprezentovala českou a moravskou spektroskopii, přibližně polovina pak spektroskopii slovenskou.

Většina účastníků se setkala již v průběhu nedělního uvítacího večera u dobré večeře, v pondělí ráno proto mohla konference „odstartovat“ v plném počtu. Konferenci zahájili předseda Slovenské spektroskopické společnosti profesor Marcel Bruno Miglierini společně s předsedkyní organizačního výboru konference docentkou Silvií Ružičkovou a předsedou Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci profesorem Viktorem Kanickým. Vzpomínkové přednášky věnované památce profesora Mikuláše Mathernyho přednesli profesor Karol Flórián a profesor Hubertus Nickel. Je škoda, že se ze zdravotních důvodů konference nezúčastnil profesor Eduard Plško. V desíti sekcích, které s výjimkou středečního odpoledne zaplnily konferenční program od pondělního dopoledne do čtvrtečního oběda, zaznělo celkem 39 přednášek a 7 firemních prezentací. S vyzvanými přednáškami vystoupili Ernest Beinrohr, Jiří Dědina, Bohumil Dočekal, Viktor Kanický, Adriana Lančok, Pavel Matějka, Jozef Sitek a Gyula Záray. Úterní večer byl věnován posterové sekci s 25 plakátovými sděleními.

V příspěvcích se objevila většina používaných nebo nově vyvíjených spektroskopických analytických metod: optická a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem, plazmová spektrometrie s využitím laserového záření, plazmová spektrometrie ICP-OES s elektrotermickou vaporizací, optická emisní spektrometrie s doutnavým výbojem, atomová fluorescence (AFS), atomová absorpční spektrometrie (AAS) s elektrotermickou atomizací (ETA), AAS a AFS s atomizací v plazmatu dielektrického bariérového výboje, AAS se zdrojem spojitého záření pro ET a plamenovou atomizací, AAS s generováním těkavých hydridů včetně fotochemických reakcí, metody využívající synchrotronového a cyklotronového záření, jaderné rezonance, vibrační spektrometrie (IR, Raman) včetně technik s využitím povrchem zesíleného signálu, chiroptické metody, Mössbauerova spektrometrie, hmotnostní

spektrometrie s plynovou chromatografií. Příspěvky byly věnovány i přípravě vzorků (např. sekvenční extrakce, mikroextrakce), analýze biologických, kovových, keramických, geologických, paleontologických a environmentálních materiálů a předmětů kulturního dědictví. Pozornost byla věnována zkoumání nanočástic a jejich účinků na biologické systémy.

Středeční slavnostní konferenční večer byla spojena s udělením ocenění obou spektroskopických společností a vyhlášením výsledků soutěže o nejlepší plakátové sdělení, nejlepší studentské plakátové sdělení a nejlepší studentskou přednášku. Čestné členství Slovenské spektroskopické společnosti obdrželi od prof. Miglieriniho Bohumil Dočekal, Viktor Kanický, Ján Medved' a Mária Žemberyová.



Čestné členství Slovenské spektroskopické společnosti obdržel od prof. Miglieriniho doc. Bohumil Dočekal



Udělení Čestného členství Slovenské spektroskopické společnosti prof. Viktoru Kanickému

Medaili se jménem Nicolaus Konkoly-Thege (významný slovenský badatel v oboru astrofyziky a astronomické fotografie a spektroskopie) převzali z rukou předsedy Slovenské spektroskopické společnosti Jiří Dědina a Jozef Sitek. Medaili Jana Marka Marci udělil jménem Spektroskopické

společnosti JMM její předseda Viktor Kanický doc. Janě Kubové.



Udělení Medaile se jménem Nicolaus Konkoly-Thege prof. Jiřímu Dědinovi



Udělení Medaile Jana Marka Marci doc. Janě Kubové.

Jako nejlepší plakátová sdělení byly hodnotící komisí vybrány tyto příspěvky: 1. Milan Svoboda (Milan Svoboda, Jan Kratzer, Věra Šindelářová, Marek Straka, Jakub Hraníček, Antje Michels, Joachim Franzke, Jiří Dědina): Novel designs of dielectric barrier discharge atomizers of volatile compounds for AAS and AFS; 2. Michaela Vašinová Galiová (Barbora Svatošová, Michaela Vašinová Galiová, Jitka Míková, Lubomír Prokeš, Hélène Tabouret, Christophe Pécheyran, Viktor Kanický): Analysis of Antarctic Otoliths by Laser Ablation Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry; 3. Vladislava Mičková (Vladislava Mičková, Silvia Ružičková, Marianna Dorková, Dagmar Remeteiová): Temperature Influence on Electrothermal Vaporization Process of Heavy Metals in Different Matrices by Use of ETV-ICP-OES Method. Nejlepší studentské plakátové sdělení prezentovala Adéla Jenišťová (Adéla Jenišťová, Jaroslava Šmolíková, Martin Flegel, Pavel Matějka): Vibrational Spectroscopic Study of Interactions Between Skin and Peptides Based on the Argireline Structure.

Nejlepší studentskou přednášku, vybranou rovněž hodnotící komisí, jsme vyslechli od Martina Šebesty (Martin Šebesta, Martin Urík, Marek Kolenčík, Peter Matúš, Gabriela Kratošová, Ivo Vávra, Andrej Vojtko, Eva Majková): Characterizing ZnO Nanoparticles and their Interaction with Humic Acids.

Středa odpoledne byla ve znamení poznávacího výletu. Návštěva biofarmy Východná byla spojena s prohlídkou „komfortního“ ustájení hovězího skotu a s ochutnávkou a nákupem vynikajících liptovských sýrů, cesta do Liptovského Mikuláše byla zaměřena na návštěvu pozoruhodného Slovenského muzea ochrany přírody a speleologie. Muzeum zaujalo účastníky exkurze natolik, že jsme se vraceli do hotelu s mírným zpožděním. Moderní a netradiční expozice byly velmi zajímavé, poučné a zábavné a zasluhují si při některé z dalších cest za krásami Slovenska další návštěvu. Zajímavé však bylo i samotné městečko Liptovský Ján s jeho 13 kaštelů, románsko-gotickým kostelem sv. Jana Křtitele, léčivými prameny a přírodním termálním koupalištěm. V teplé minerálce jsme se koupali i v hotelovém bazénu, což byla příjemná relaxace



Konference zanechala ve všech účastnících skvělé dojmy z odborného programu i programu společenského. I při typickém podzimním počasí se podařilo uskutečnit turistické výlety, například do Jánské doliny. Organizační výbor konference odvedl perfektní práci, obzvláštní poděkování patří zejména Silvii Ružičkové, Dagmar Remeteiové a Peteru Matúšovi. K finančnímu zabezpečení konference významně přispěli generální sponzoři Pragolab a Thermo Fisher Scientific, a dále Messer, Shimadzu, Centralchem, Labicom, Spectro Aps, ChromSpec, Analytika, Merck, Optik Instruments, Amedis, Renishaw, Lambda Life a Specion. Děkujeme za podporu. Účastníci konference se mohli seznámit s laboratorními novinkami v rámci firemních expozic a při přednáškách a konzultacích.

XXI. Slovensko-česká spektroskopická konferencie bola úspešným vedeckým setkáním, ktoré potvrdilo oboustranný záujem slovenskej a českej odbornej spektroskopické komunity o spoločné akcie. Milí

prátele, zveme Vás na 16. Česko-slovenskou spektroskopickou konferenciu, ktorá sa uskutoční v roku 2018 v jarných Luhačovicích.

Udělení Medaile Jana Marka Marci

Udělení Medaile Jana Marka Marci doc. RNDr. Janě Kubové, PhD.

Prof. Ing. Eduard Plško, DrSc.

Rodená prešporáčka študovala po absolvovaní základnej školy a maturite na Strednej priemyselnej škole chemickej v Bratislave analytickú chémiu na Prírodovedeckej fakulte Univerzity Komenského. Po úspešnom absolvovaní vysokoškolského štúdia nastúpila v roku 1970 na Geologický ústav Prírodovedeckej fakulty UK, kde ako školiteľka jednej doktorandky pôsobí dodnes.

Vedeckovýskumná činnosť doc. Kubovej bola zo začiatku orientovaná najmä na riešenie základných problémov spektrochemickej analýzy za použitia budenia spektier elektrickým oblúkom, ďalej na vypracovanie, overenie a aplikáciu emisných spektrochemických metód na stanovenie stopových prvkov (napr. B, V, Be, prvkov vzácnych zemín a i.) v prírodných materiáloch (horniny, minerály, vody a i.).

V roku 1972 úspešne obhájila rigoróznou prácu. Výsledky v oblasti použitia atómovej emisnej spektrometrie s novým budiacim zdrojom – indukčne viazanou plazmou pri analýze vzoriek životného prostredia (napr. stanovenie ultrastopových obsahov prvkov vzácnych zemín v minerálnych vodách) sa stali podkladom pre vypracovanie dizertačnej práce, ktorú pod vedením prof. Plška obhájila v roku 1986. V roku 1992 získala od Slovenskej akadémie vied vedecký kvalifikačný stupeň IIa (samostatný vedecký pracovník). V roku 2004 habilitovala v odbore Analytická chémia.

V minulosti bola vedúcou Analytického oddelenia a zástupkyňou riaditeľa Geologického ústavu (od roku 2012 Ústavu laboratorného výskumu geomateriálov) Prírodovedeckej fakulty UK. Pod jej vedením a vďaka jej zahraničným kontaktom sa pracovisku v roku 2008 ako prvému z vysokých škôl v rámci Slovenska podarilo získať hmotnostný spektrometer s indukčne viazanou plazmou (ICP MS).

V poslednej dobe sa venuje okrem problematiky analytickej geochemie aj separačno-prekoncentračným postupom, frakcionácii hliníka a ťažkých kovov a stanoveniu jódu v environmentálnych vzorkách. Bola spoluriešiteľkou takmer 20 výskumných úloh a projektov a vedúcou 5 grantov VEGA a APVV. Absolvovala viacero študijných pobytov na zahraničných univerzitách a vedeckých ústavoch (Univerzita M. Luthera v Halle-Wittenbergu, Univerzita v Ljubljane, Národný chemický ústav v Ljubljane), kde sa zúčastňovala na riešení spoločných vedeckých projektov.

Má bohatú publikačnú činnosť – vyšlo jej viac ako 330 pôvodných publikácií, z toho vyše 50 článkov v karentovaných časopisoch s množstvom WOS a Scopus citácií (viac ako 440) a desiatky výskumných správ. Je spoluautorkou 2 monografií. Dlhé roky bola členkou Atomic Spectrometry Updates Editorial Board zahraničného karentovaného časopisu Journal of Analytical Atomic Spectrometry (Royal Society of Chemistry, Veľká Británia).

Nie menej významná je i jej pedagogická práca. Študentom geologických programov a environmentalistiky prednášala analytickú geochemiu, analytické metódy v geológii, metódy laboratorného výskumu prírodných materiálov, moderné analytické metódy v hydrochémií, spektroskopické analytické metódy a techniky špeciálnej analýzy a frakcionácie prvkov v prírodných materiáloch. Na Prírodovedeckej fakulte UK pôsobila ako spolugarantka, členka odborovej komisie a školiteľka v doktorandskom programe Environmentálna geochemia.

Aktívne sa zapájala aj do odbornej spolkovej činnosti. Bola dlhoročnou členkou Hlavného výboru Československej spektroskopickéj spoločnosti pri ČSAV v Prahe – vedúcou odbornej skupiny nevodivých materiálov a po rozdelení Československa bola spoluzakladateľkou Slovenskej spektroskopickéj spoločnosti, kde pôsobila dlhé roky v Hlavnom výbore a jeho Predsedníctve vo funkcii

I. miestopredsedyne a vedeckej tajomníčky. Je predsedkyňou Redakčnej rady Spravodaja SSS. Zastávala aj funkciu vedúcej posudzovateľky Slovenskej národnej akreditačnej služby pre oblasť akreditácie skúšobných laboratórií.

Podieľala sa na organizovaní viacerých domácich odborných podujatí (školení, kurzov, seminárov, konferencií a pod.), kde aj aktívne vystupovala. Tu je potrebné vyzdvihnúť najmä jej úspešné organizovanie troch posledných ročníkov spektroskopických konferencií na Slovensku v pozícii predsedkyne Organizačného výboru (XVIII. Slovenská spektroskopická konferencia, Spišská Nová Ves, 2006; XIX. Slovensko-Česká spektroskopická konferencia, Častá-Papiernička, 2008; XX. Slovensko-Česká spektroskopická konferencia spojená s prestížnym European Symposium on Atomic Spectrometry ESAS, Tatranská Lomnica, 2012).

Okrem cien za prezentovanie výsledkov z rôznych konferencií je držiteľkou viacerých ocenení (Čestné uznanie za významný prínos pre rozvoj laboratórií v rezorte geológie, Štátny geologický ústav Dionýza Štúra Bratislava, 2003; Pamätný list pri príležitosti 70. výročia Prírodovedeckej fakulty UK, 2010; Čestné členstvo v Spektroskopickej spoločnosti Jana Marka Marci, 2010; Zlatá medaila Prírodovedeckej fakulty UK, 2011; Čestné členstvo v Slovenskej spektroskopickej spoločnosti, 2012).

Doc. RNDr. Jana Kubová, PhD. sa svojou bohatou a všestrannou činnosťou v oblasti spektrálnej analýzy významne zapísala do povedomia slovenskej a českej odbornej komunity. Je uznávanou vedeckou osobnosťou atómovej spektroskopie doma i v zahraničí.

Projekt české terminologie

Projekt české terminologie pro hmotnostní spektrometrii

Tiskové oznámení

J. Havliš, M. Holčapek a M. Volný

V roce 2011 se na 12. škole hmotnostní spektrometrie skupinka účastníků rozhodla založit projekt, jenž by umožnil standardizaci českého názvosloví v hmotnostní spektrometrii. Projekt byl představen o rok později na téže akci a začala se formovat širší skupina, která se ho ujala (J. Havliš, M. Holčapek, J. Preisler, P. Španěl, M. Volný).

Hlavním cílem bylo a je poskytnout všude tam, kde se o hmotnostní spektrometrii mluví česky, tj. v učebnicích a přednáškách, v odborné i populárně naučné literatuře, relevantní zázemí ve formě životaschopného českého názvosloví metod, jevů, přístrojů a principů souvisejících s hmotnostní spektrometrií.

A nyní, v roce 2016, tento kolektiv připravil a předložil projekt **Česká terminologie hmotnostní spektrometrie** odborné spektrometrické i jazykové veřejnosti k dispozici zde: <http://terminologie-ms.sci.muni.cz>

Základem projektu je překlad anglického originálu *Definitions of terms relating to mass spectrometry (IUPAC Recommendations 2013)* publikovaného v roce 2013 (Murray a kol., *Pure Appl Chem*, 85 (2013) 1515).

Jde o otevřený, moderovaný projekt encyklopedické povahy (doplněný souhrnným textem téhož obsahu), umožňující aktivní budování názvosloví ve spolupráci s uživateli. Po registraci na portálu se uživatelé mohou vyjadřovat k již existujícím vstupům a navrhnout vstupy nové. Redaktoři pak zodpovídají za zohlednění uživatelských komentářů a poznámek (úprava stávajících či tvorba nových hesel).

Doufáme, že se do projektu zapojíte a že bude užitečný i Vám.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie, ročník 2016

Tomáš Matoušek

V programu prosincové schůze Hlavního výboru Spektroskopické společnosti JMM je tradičně hlavním bodem programu soutěž o nejlepší práce mladých autorů v oboru spektroskopie. Na práce přihlášené v říjnu nejprve necháváme vypracovat posudky odborníky z oboru, po jednom na diplomové práce a po dvou na příspěvky v kategorii publikovaných prací a jejich souborů. Tyto posudky jsou spolu s prezentacemi soutěžících podkladem pro hodnocení Hlavním výborem a udělení cen. Role čestného předsedy poroty letošního ročníku se ujal **profesor Vladimír Sklenář**.

Stejně jako v minulém ročníku se sešel vysoký počet kvalitních příspěvků. V kategorii A jsme dostali osm přihlášek diplomových prací. Porotu i recenzenta nejvíce oslnila a první cenu si odnesla **Mgr. Barbora Svatošová** z Ústavu chemie Masarykovy univerzity. Druhou cenou jsme ocenili práci **Mgr. Michala Rosůlka**, která vznikla v Laboratoři strukturní biologie a buněčné signalizace Mikrobiologického ústavu AV ČR, v.v.i., a třetí cenu získal **Mgr. Miloslav Surýnek** z Katedry chemické fyziky a optiky Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy.

Ještě o jeden víc, tedy devět příspěvků, bylo přihlášeno v kategorii publikovaných prací. Jako nejlepší byla vyhodnocena a první cenou byla odměněna práce **RNDr. Lukáše Nádvořníka, Ph.D.**, z Fyzikálního ústavu AV ČR, v.v.i. Druhou cenu získal **Mgr. Jan Vícha, Ph.D.** z Centra polymerních systémů Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně. Po těsných výsledcích hlasování se Hlavní výbor rozhodl udělit třetí cenu dokonce třem soutěžícím: **Mgr. Janu Novotnému, Ph.D.** ze Středoevropského technologického institutu (CEITEC) a Masarykovy Univerzity, **Ing. Lucii Habartové** z Ústavu analytické chemie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze a **MSc. Michaelu Grebeňovi** z Katedry chemické fyziky a optiky Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy.

Souhrny všech oceněných prací přinášíme níže.



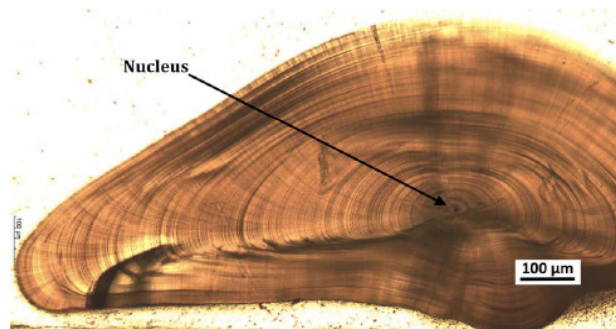
Blahopřání Mgr. Barboře Svatošové k první ceně v kategorii diplomových prací

Analýza antarktických otolitů pomocí hmotnostní spektrometrie

Barbora Svatošová, 1. cena v kategorii diplomových prací

Otolity neboli ušní kameny, tvořené především uhličitánem vápenatým, se nacházejí ve vnitřním uchu všech teleostních ryb. Otolit roste po celý život jedince a uchovává informace z životního prostředí, ve kterém se ryba pohybovala. Tím je možné retrospektivně určit migrační cesty, potravní řetězce či různé environmentální události.

Tato práce se zabývá analýzou unikátních vzorků otolitů, které pocházejí z 33 jedinců zastupujících pět druhů antarktických ryb (*Trematomus hansonii*, *T. newnesi*, *T. bernacchi*, *Parachaenichthys charcoti* a *Notothenia coriiceps*). Vzorky byly získány v lednu 2014 během polární expedice na české stanici J. G. Mendela na ostrově Jamese Rosse u pobřeží Antarktidy. Z každé ryby byly v ideálním případě odebrány 3 páry otolitů (*sagitta*, *asteriscus* a *lapillus*), přičemž k analýze byly použity pouze největší, tj. sagitální otolity.



Obr. 1 Otolit TrNe06 s viditelnými denními přírůstky a jádrem (nucleus)

K prvkové analýze antarktických otolitů byla použita hmotnostní spektrometrie indukčně vázaného plazmatu s vnášením vzorku laserovou ablací (LA-ICP-MS). S hmotnostními spektrometry s dvojitým fokusací byly spojeny dva druhy laserů, jejichž zásadní odlišnost spočívá v rozdílné délce laserového pulsu: femtosekundový (fs) a nanosekundový (ns). Krátké (>1 ps) a ultrakrátké (<1 ps) laserové pulzy se liší už v základních principech celého procesu laserové ablace. Netermický charakter fs ablace minimalizuje frakcionaci spojenou se selektivním vypařováním při interakci paprsku se vzorkem. V případě ns ablace je takto vyvolaná frakcionace výraznější. Při ultrakrátkých pulzech je generován aerosol charakterizovaný distribucí velikosti částic v oblasti jednotek až nižších stovek nanometrů, kdežto při nanosekundových pulzech jsou generovány také částice v oblasti mikrometrových rozměrů. Malé částice (< 150 nm) se v ICP dokonale odpaří a atomizují, a proto materiál v plazmatu lépe reprezentuje stechiometrii složení ablatovaného vzorku než v případě ns pulzů, kdy se větší částice v ICP odpaří pouze částečně. Experimenty s fs laserovým systémem byly provedeny ve Francii v laboratoři Laboratoire de Chimie Analytique, Bioinorganique et Environnement na pracovišti Plateforme d'Analyse des Métaux Traces par Ablation Laser univerzity v Pau (Université de Pau et des Pays de l'Adour).

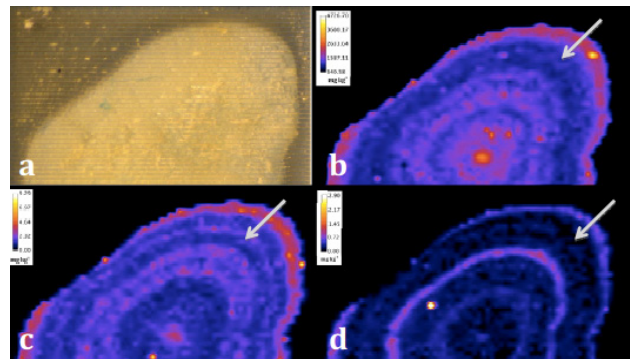
Porovnání výsledků měření z obou laserových ablačních systémů přineslo zajímavé poznatky z hlediska limitů detekce a citlivosti, které jsou klíčové pro ultrastopovou analýzu. Při vyhodnocování experimentálních dat byla zohledněna rozdílná ablační rychlost při ablaci standardů a vzorků. Využitím fs laseru bylo dosaženo větší citlivosti a výrazně nižších limitů detekce.

Distribuce jednotlivých prvků v otolitu byly vyjádřeny pomocí poměrů obsahů, konkrétně Sr/Ca, Ba/Ca a Mn/Ca, které jsou významnými ukazateli migračních cest. Mimo prvky běžně se vyskytující v otolitech, tj. Mg, Ba, Sr, Mn, Cu, Fe a Zn, bylo výzvou stanovit obsahy těžkých kovů (Ag, Cr, Hg, Cd, Pb), které by mohly indikovat znečištění této oblasti. Dosud bylo publikováno několik studií, které se zabývají například akumulací rtuti v měkkých tkáních antarktických ryb^{1,2}, avšak v otolitech se podobný závěr prokázat nepodařilo. Obsahy těchto prvků byly pod limitem detekce a to i s použitím fs laseru.

Průměrný obsah stroncia v otolitech z jednotlivých druhů se pohyboval okolo hodnoty 2500 mg kg⁻¹. Je tedy patrné, že testované ryby žily ve stálém životním prostředí bez radikálních změn. Dalším zajímavým

výsledkem je informace o obsahu barya, který se pohyboval v řádech jednotek mg kg⁻¹, což naznačuje slabou inkorporaci tohoto prvku do otolitů. Navzdory nízkému obsahu barya však byly nalezeny charakteristické píky Ba/Ca především v jádrech otolitů u druhu *Trematomus hansonii*. I přes vysokou koncentraci hořčíku v mořské vodě 1826±21 mg l⁻¹, v otolitech byl stanoven relativně nízký obsah Mg (5±10-122±38 mg kg⁻¹). Stanovení manganu ve vzorcích bylo možné pouze s využitím fs laseru a to pouze v řádech desetin až jednotek mg kg⁻¹. Výrazný nárůst manganu byl zaznamenán v oblasti jádra u několika jedinců rodu *Trematomus bernacchi*. Detekce izotopů zinku, mědi, železa a olova byla už velmi obtížná vzhledem k nízkým obsahům těchto prvků v otolitech.

Kromě elementárního složení byly stanoveny i izotopové poměry stroncia ⁸⁷Sr/⁸⁶Sr pomocí fs-LA-MC-ICP-MS. Poměr izotopů stroncia je alternativou k poměru Sr/Ca, jelikož přímo odráží Sr poměr v okolní vodě, který závisí na geologickém složení povodí řeky³, popř. mořského dna. Tato analýza potvrdila dřívější hypotézu stabilního životního prostředí a nepotvrdila ani výraznější migraci testovaných jedinců. Pro detailní znázornění distribuce jednotlivých prvků v těchto vzácných vzorcích bylo provedeno mapování celých otolitů.



Obr. 2 Fotografie otolitu TrHa33 (a), distribuce ⁸⁸Sr (b), ¹³⁸Ba (c) a ⁵⁵Mn (d)

Analýza otolitů antarktických ryb přináší nové a jedinečné poznatky o dosud relativně málo známých druzích ryb, o jejich chování a především o prostředí, v němž žijí. Tato práce je tedy důležitým článkem v oblasti informací o antarktické fauně.

Literatura:

- 1) Goutte, A.; Cherel, Y.; Churlaud, C.; Ponthus, J.-P.; Massé, G.; Bustamante, P. *Science of the Total Environment*. **2015**, 538, 743-749.
- 2) Wintle, N. J. P.; Sleadd, I. M.; Gundersen, D. T.; Kohl, K.; Buckley B. A. *Bull Environ Contam Toxicol*, **2015**, 95, 557-560.

3) Walther, B. D.; Thorrold, S. R. *Journal of Geochemical Exploration*. 2009, 102, 181-186.



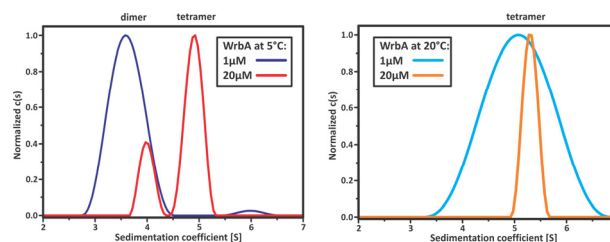
Gratulace Mgr. Michalu Rosůlkovi ke druhé ceně v kategorii diplomových prací

Studium vlivu kofaktoru na strukturu proteinu pomocí hmotnostní spektrometrie

Michal Rosůlek, 2. cena v kategorii diplomových prací

Funkce proteinů v organismech je úzce spojena nejen s jejich terciární strukturou, ale velmi často souvisí také s jejich kvartérním uspořádáním. Proteiny rodiny WrbA (Tryptophan repressor binding protein A), vyskytující se v různých druzích organismů, mají fyziologickou roli v obraně buněk před oxidativním stresem. Oxidoreduktasová aktivita těchto proteinů je závislá na přítomnosti flavinových kofaktorů, kterým je v případě studovaného proteinu WrbA z *E. coli* flavinmononukleotid (FMN). Dřívější studie ukázaly, že protein WrbA se v roztocích udržuje ve formě dimerů a tetramerů, které jsou ve vzájemné rovnováze.¹ Trojrozměrné tetramerové struktury proteinu WrbA byly vyřešeny pomocí rentgenové krystalografie jak pro formu bez kofaktoru, tak s kofaktorem v jeho vazebných místech. Ukázalo se, že v závislosti na přítomnosti kofaktoru se v asymetrických jednotkách krystalu nachází vždy odlišně uspořádaný proteinový dimer.^{2, 3} Cílem této práce bylo popsat vliv vazby FMN na terciární a kvartérní strukturu proteinu a dále určit, který z dvou možných dimerů se ve vodných roztocích nachází.

Nejprve bylo nutné stanovit experimentální podmínky, při nichž je možné dimer proteinu WrbA v roztoku pozorovat. Podmínky přítomnosti volného dimeru proteinu byly stanoveny RNDr. Ondřejem Vaňkem, Ph.D. pomocí analytické ultracentrifugy metodou sedimentační rychlosti. (Obr. č. 1).



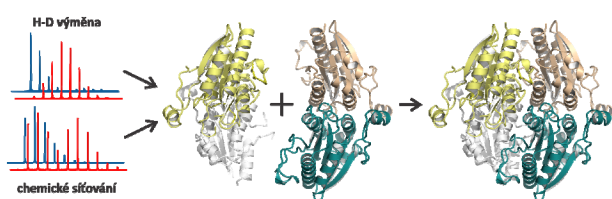
Obr.1 Sedimentační koeficient proteinu WrbA při různých koncentracích a teplotách určený pomocí analytické ultracentrifugace.

Dimer proteinu WrbA byl pozorován pouze při mikromolární koncentraci a za snížené teploty, tedy v podmínkách, při kterých nelze úspěšně aplikovat standardní metody studia trojrozměrné struktury proteinů, jakými jsou NMR, rentgenová krystalografie nebo kryoelektronová mikroskopie. Z tohoto důvodu byly ke studiu dynamiky proteinu WrbA v roztoku využity strukturně biologické metody chemického síťování a vodík-deuteriové (H-D) výměny s následnou hmotnostně spektrometrickou analýzou vzniklých produktů.

V případě vodík-deuteriové výměny, sledované na amidických vodících proteinové páteře, byl protein vystaven nadbytku deuterovaného rozpouštědla. Z takovéto reakční směsi byly v přesně stanovených intervalech odebírány alikvoty, v nichž byla H-D výměna výrazně zpomalena jejich okyselením a okamžitým zamrazením. Pomocí hmotnostního spektrometru s iontově cyklotronovou celou s Fourierovou transformací (FT-ICR) byly následně ve vysokém rozlišení analyzovány peptidy, u nichž byla sledována procentuální změna deuterace v čase. H-D výměna poskytla obecné informace o přístupnosti solventu k jednotlivým peptidům, přičemž nejvyšší změny deuterace byly zaznamenány zejména v místech interakce dvou monomerních jednotek proteinu. Takto bylo určeno dimerizační rozhraní proteinu WrbA v roztoku a dále byl touto metodou odhalen také výrazný stabilizační efekt FMN na tetramerní uspořádání proteinu.

Chemické síťování umožňuje získat informace o vzdálenostech jednotlivých aminokyselin proteinu v trojrozměrném prostoru. Chemické činidlo zprostředkovává kovalentní spojení vhodně orientovaných funkčních skupin aminokyselin a podle délky spojovacího raménka lze určit maximální vzdálenost zesítěných aminokyselin. Chemickým síťováním bylo potvrzeno dimerizační rozhraní, a tím i mechanismus skládání tetramerního komplexu proteinu. Současně byla pomocí chemického síťování odhalena vysoká flexibilita smyček v periferních oblastech proteinu, a to i ve

stabilní tetramerní struktura s navázaným kofaktorem.



Obr.2 Dimerizační a tetramerizační rozhraní proteinu WrbA určená H-D výměnou a chemickým síťováním.

Kombinací analytické ultracentrifugace a dvou strukturálně biologických technik využívajících hmotnostní spektrometrii byla popsána dynamika proteinu WrbA ve vodných roztocích. Konkrétně bylo určeno jeho dimerizační a tetramerizační rozhraní (Obr. č. 2), dále byly nalezeny jeho vysoce flexibilní oblasti a byl také popsán stabilizační efekt kofaktoru na jeho tetramerní uspořádání.

Literatura:

1. Grandori, R.; Khalifah, P.; Boice, J. A.; Fairman, R.; Giovanielli, K.; Carey, J., *The Journal of biological chemistry* **1998**, 273 (33), 20960-6.
2. Kishko, I.; Carey, J.; Reha, D.; Brynda, J.; Winkler, R.; Harish, B.; Guerra, R.; Ettrichova, O.; Kukacka, Z.; Sheryemyetyeva, O.; Novak, P.; Kutý, M.; Kuta Smatanova, I.; Ettrich, R.; Lapkouski, M., *Acta crystallographica. Section D, Biological crystallography* **2013**, 69 (Pt 9), 1748-57.
3. Andrade, S. L.; Patridge, E. V.; Ferry, J. G.; Einsle, O., *J Bacteriol* **2007**, 189 (24), 9101-7.



Mgr. Miloslav Surýnek obdržel třetí cenu v kategorii diplomových prací

Optická spektroskopie magneticky uspořádaných materiálů

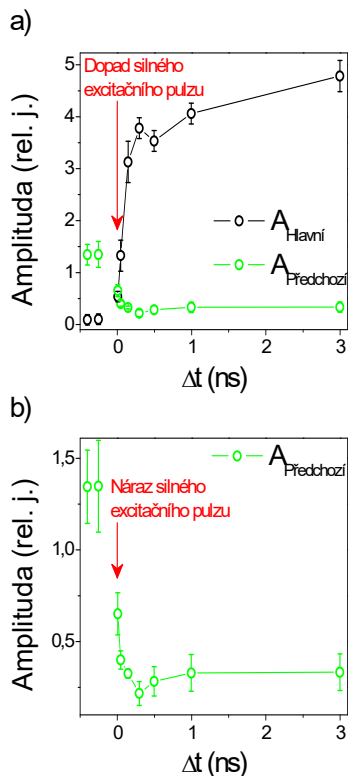
Miloslav Surýnek, 3. cena v kategorii diplomových prací

Spintronika je dynamicky rozvíjející se obor elektroniky, jenž pro přenos, zpracování a uchování informace nepoužívá pouze náboje elektronu, ale také jeho spin. Využití spintronické technologie by mohlo vést k mnohem rychlejšímu a energeticky mnohem více efektivním součástkám. Materiály vhodné ke konstrukci takovýchto spintronických součástek avšak musí být schopny uchovávat spinové uspořádání dostatečně dlouhou dobu. Kromě toho musí být tyto materiály schopny napříč součástkou současně rychle a daleko přenášet spin elektronu.

V nedávné minulosti bylo na našem oddělení zjištěno, že na rozhraní GaAs a GaAlAs vzniká dvoudimenzionální elektronový plyn, který kombinuje obě výše zmíněné vlastnosti, tedy současně velkou pohyblivost elektronů a velice dlouhé doby spinové koherence¹. Cílem této diplomové práce bylo vymyslet a realizovat experimenty, které by nám umožnily pomocí časově rozlišené laserové spektroskopie získat další informace o tomto velice zajímavém modelovém systému.

Z mnoha provedených experimentů je vhodné zmínit například měření pomocí metody excitace a sondování modifikované o vydělovač optických pulzů. Díky ne zcela ideálně fungujícímu vydělovači bylo možno vytvořit sled laserových pulzů, z nichž každý druhý je podstatně slabší. Tohoto bylo unikátním způsobem využito pro metodu Rezonančního spinového zesílení², pomocí níž se nám podařilo od sebe jednoznačně oddělit signály související s elektronovým plynem vytvořeným v různých časech.

Pomocí této námi vyvinuté experimentální metody se ukázalo, že vlivem nově dopadajícího laserového pulzu dochází k velice rychlé ztrátě spinové polarizace elektronového plynu foto-injektovaného předcházejícím pulzem (Obr. 1). Konzistentně s tímto zjištěním jsme z měření nukleární spinové polarizace³ prokázali pokles účinnosti injekce celkové spinové polarizace do studovaného elektronového systému vlivem excitace silnými excitačními pulzy. Z těchto měření je v současné době připravována publikace, u které je v blízké budoucnosti plánováno zaslání do časopisu *Physical Review B*.⁴



Obr.1: a) Vývoj amplitudy příspěvku oscilací od předchozího $A_{\text{Parazitní}}$ a hlavního $A_{\text{Hlavní}}$ pulzu v závislosti na zpoždění. b) Detail závislosti amplitudy $A_{\text{Parazitní}}$ od parazitního pulzu na zpoždění.

Experimentální metoda vyvinutá v rámci této diplomové práce umožňující od sebe jednoznačně oddělit příspěvky spinové polarizace injektované v různých časech je přitom aplikovatelná i na jiné materiálové systémy a může tak pomoci pochopit složité děje zkoumané v oboru spintroniky.

Literatura:

- 1) Nádvořník, L., P. Němec, T. Janda, K. Olejník, V. Novák, V. Skoromets, H. Němec, P. Kužel, F. Trojánek, T. Jungwirth, J. Wunderlich. Long-range and high-speed electronic spin-transport at a GaAs/AlGaAs semiconductor interface. *Sci. Rep.*, 6, 22901, **2016**.
- 2) Kikkawa, J., D. Awschalom. Resonant Spin Amplification in n-Type GaAs. *Phys. Rev. Lett.*, 80, 4313, **1998**.
- 3) Salis, G., A. Fuhrer, S. F. Alvarado: Signatures of dynamically polarized nuclear spins in all-electrical lateral spin transport devices. *Phys. Rev. B*, 80, 115332, **2009**.
- 4) L. Nádvořník, M. Surýnek, P. Němec, K. Olejník, V. Novák, J. Wunderlich, F. Trojánek, T. Jungwirth. Stability of an optically generated long-lived electron spin-system at an undoped GaAs/AlGaAs semiconductor interface. In preparation to *Phys. Rev. B*



První cena v kategorii publikovaných prací patří RNDr. Lukáši Nádvořníkovi, Ph.D.

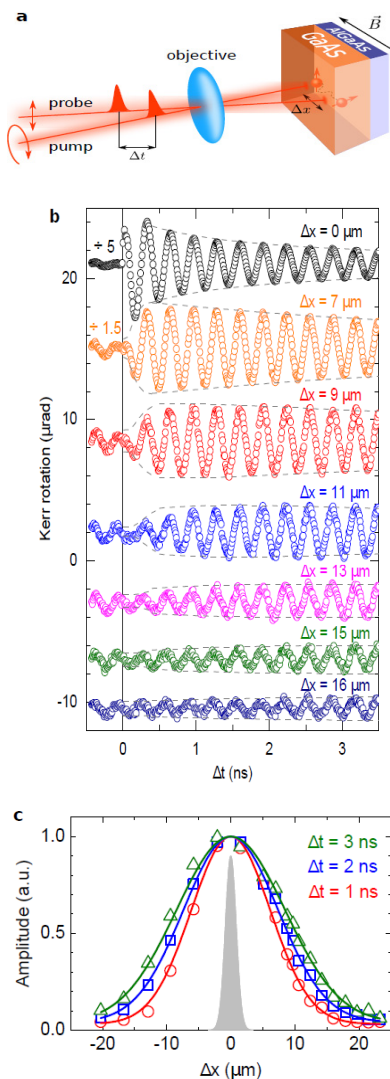
Daleko-dosahový a rychlý spinový transport na polovodičovém rozhraní GaAs/AlGaAs

Lukáš Nádvořník, 1. cena v kategorii publikovaných prací

Spinově polarizovaný elektrický proud je nejzákladnějším konceptem moderní spintroniky. Na rozdíl od spinového transportu mezi feromagnetickými vrstvami (například GMR senzory v pevných discích), který probíhá typicky přes vzdálenosti v řádu nanometrů, v laterálních spintronických součástkách, jako jsou spinové transistory nebo spinové ventily, musí být zaručen spinový transport na vzdálenost o tři řády vyšší ($> 1 \mu\text{m}$)¹. Pro efektivní funkcionalitu těchto součástek jsou, vzhledem k uvedeným rozměrům, klíčovými parametry spinová transportní délka (doba života spinové polarizace a transportní koeficienty) a rychlost transportu (pohyblivost nositelů spinu). Nicméně dosažení nadstandardně příznivých hodnot u obou těchto veličin je stále významná experimentální výzva – materiály s vysokou pohyblivostí nosičů jsou typické svou velmi efektivní spinovou relaxací, a tedy i velmi krátkým prostorovým dosahem spinového transportu, a naopak².

Naše studie³ využívá unikátní prostorově a časově rozlišenou spektroskopickou metodu (Obr. 1a)⁴ a demonstruje nový způsob, jakým lze v modelovém materiálu typu GaAs/AlGaAs potlačit nezávisle spinovou relaxaci bez omezení jejich elektrické pohyblivosti pomocí elektrické separace fotonosičů. Fyzikální mechanismus je založen na zabudovaném elektrickém poli, které vzniká jako důsledek fixace Fermiho meze poblíž valenčního pásu vlivem zbytkových objemových a povrchových stavů v materiálech na bázi GaAs⁵. Foto-excitované elektrony a díry jsou v tomto elektrickém poli prostorově separovány, čímž je zmenšen jejich

prostorový překryv a potlačena rekombinace. Tento mechanismus je tedy vnitřní vlastností nedopovaných jednoduchých GAs/AlGaAs rozhraní a struktura nevyžaduje žádné další zásahy. Pozorovaný transport spinu elektronů přes vzdálenost větší než 10 μm na časové škále jednotek nanosekund (Obr. 1b,c) v takto mimořádně jednoduchém polovodičovém systému bez nutnosti použití elektrických hradel nebo optimalizace dopování je centrálním závěrem studie.



Obr. 1 (a) Schématické znázornění techniky excitace (pump) a sondování (probe). Časové rozlišení je dosahováno zpožděním 120 fs dlouhých pulzů obou svazků o čas Δt , prostorové rozlišení (separace svazků na povrchu vzorku o Δx) zajišťuje objektiv s vysokým zvětšením a piezo-naklápěcí zrcadlo v jednom ze svazků. (b) Ukázky časových dynamik spinové polarizace foto-excitovaných elektronů v závislosti na Δx . Nárůst signálu v čase pro $\Delta x \neq 0$ je indikátorem nelokálního experimentu. (c) Závislost amplitudy spinové polarizace na Δx pro několik Δt . Šedá oblast představuje prostorovou šířku excitačního svazku na povrchu vzorku.

Daleko-dosahový a rychlý spinový transport byl námi pozorován v celé řadě nedopovaných rozhraní. Studovaný jev je značně robustní vůči změnám parametrů struktury či okrajovým podmínkám, což předjímá jeho výskyt i ve strukturách na bázi jiných materiálů a jeho aplikační potenciál. Závěry studie a parametry spinového transportu byly nezávisle potvrzeny několika dalšími experimentálními technikami, například použitím THz spektroskopie.

Reportovaný objev přináší nejen novou perspektivu pro koncepty logických spintronických součástek, ale také vybízí k revizi některých předešlých prací, jelikož tento nestandardní režim byl objeven i v komplexních strukturách, využívané pro realizaci dopovaných 2D kvantových jam, v nichž se obdobné jevy do této doby interpretovaly v jiném fyzikálním kontextu.

Literatura:

- 1) H. C. Koo, *et al.*, *Science* 325, 1515–8 (2009).
- 2) M. W. Wu *et al.*, *Phys. Rep.* 493, 61-236 (2010); T. Korn, *Phys. Rep.* 494, 415-445 (2010).
- 3) L. Nádvořník *et al.*, *Sci. Rep.* 6, 22901 (2016).
- 4) Metoda je založena na technice excitace a sondování s rozlišeními $< 1 \mu\text{m}$ a $< 1 \text{ps}$ při zachování velmi blízkého spektrálního složení excitačního i sondovacího svazku. Pro potlačení odraženého excitačního světla byla použita soustava komplementárních interferenčních spektrálních filtrů. Více informací v Supplementary information v Ref. [3].
- 5) E. Yablonovitch *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* 54, 555 (1989); M. D. Pashley *et al.*, *Phys. Rev. B* 48, 4612 (1993).



Gratulace Mgr. Janu Víchovi, Ph.D. ke druhé ceně v kategorii publikovaných prací

Vysvětlení původu abnormálních ^1H , ^{13}C a ^{29}Si NMR chemických posunů ve sloučeninách Tl^{I} a Pb^{II}

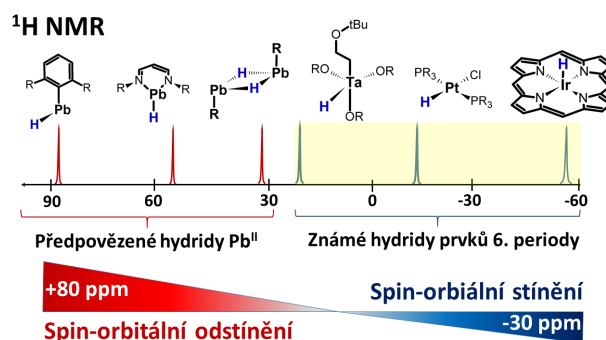
Jan Vicha, 2. cena v kategorii publikovaných prací

Chemie thalia a olova je ovlivněna přítomností tzv. inertního elektronového páru $6s^2$, což umožňuje existenci stabilních sloučenin jednomocného Tl^{I} a dvojmocného Pb^{II} s velmi zajímavými aplikacemi v chemii. Ačkoliv se jedná o diamagnetické sloučeniny, jsou signály lehkých atomů (^{13}C , ^{29}Si) přímo navázaných na těžkém prvku ve spektrech Nukleární Magnetické Rezonance (NMR) buď abnormálně odstíněny (>300 ppm pro ^{13}C v komplexech Pb^{II}), a nebo zcela chybí (některé sloučeniny Tl^{I}). Příčinu tohoto jevu se však nedařilo celá desetiletí uspokojivě vysvětlit. Až v naší nedávné práci¹ se nám s pomocí nejnovějších přístupů teoretické chemie podařilo dokázat, že hlavní příčinou abnormálních signálů LA jsou extrémní relativistické efekty, jmenovitě tzv. spin-orbitální chemický posun (δ_{SO}) indukovaný těžkým atomem, tzv. Heavy Atom-Light Atom efekt). Zatímco ve studovaných sloučeninách Pb^{II} dosahuje $\delta_{\text{SO}}(^{13}\text{C})$ až 150 ppm, ve sloučeninách Tl^{I} je to už více než 200 ppm. Příмым důsledkem značného δ_{SO} jsou pak - u diamagnetických látek vysoce neobvyklé - ^{13}C NMR chemické posuny aromatických uhlíků dosahující až 400 ppm. Signály těchto atomů se tak mohou u některých Tl^{I} sloučenin nacházet mimo měřený rozsah, což vysvětluje jejich absenci ve spektrech. Ještě několikanásobně větší δ_{SO} pak bylo nalezeno pro signály ^{29}Si v existujících látkách s vazbou Si-Pb^{II} (až 360 ppm) a předpovězeno pro sloučeniny s vazbou Si-Tl^{I} (až 1000 ppm).

Hlavní příčinou extrémních hodnot δ_{SO} jsou velmi efektivní magnetické interakce mezi okupovanými a volnými orbitály, což je umožněno i) geometrií molekuly (vazby založené na $6p$ orbitalech svírají úhel $90^\circ/180^\circ$), ii) HOMO a LUMO tvořenými převážně $6p$ orbitály, iii) malým rozdílem energií mezi HOMO a LUMO. Tato unikátní kombinace faktorů je nepřímým důsledkem relativistické stabilizace $6s^2$ orbitalu a tedy přítomnosti inertního elektronového páru. V takovémto rozsahu ji tedy lze najít pouze u sloučenin Tl^{I} a Pb^{II} (a v menší míře u Bi^{III}), zatímco např. u analogických Sn^{II} komplexů jsou tyto efekty už řádově menší.

Na rozdíl od ligandů založených na uhlíku, je ^1H NMR spektroskopie prakticky jedinou volbou pro identifikaci hydridů těžkých kovů. Zatímco hydridy Sn^{II} a Ge^{II} jsou známými katalyzátory řady unikátních reakcí, hydridy Pb^{II} se dosud popsat

nepodařilo a jejich potenciál tak zůstává velkou neznámou. Navazující práce se proto soustředí na možnosti detekce pomocí jejich ^1H signálu.² Zatímco nejvyšší dosud známé chemické ^1H posuny hydridů těžkých kovů dosahují maximálně 25 ppm, v Pb^{II} sloučeninách lze očekávat až 90 ppm, opět díky bezprecedentnímu relativistickému posunu.



Obr. 1: Schématické znázornění ^1H NMR chemických posunů známých hydridů prvků 6. periody (modrá) a předpovězených hydridů Pb^{II} (červená).

S ohledem na relativně úzký rozsah běžných ^1H NMR měření 0-20 ppm tak není překvapivé, že se přes mnohaletou snahu doposud nepodařilo hydridy olova detekovat, ačkoliv byla jejich přítomnost v reakční směsi pokládána za vysoce pravděpodobnou. V současné době pracujeme na experimentálním potvrzení našich předpovědí.

Literatura:

- 1) Vicha, J.; Marek, R.; Straka, M. *Inorg. Chem.* **2016**, 55 (4), 1770–1781.
- 2) Vicha, J.; Marek, R.; Straka, M. *Inorg. Chem.* **2016**, 55 (20), 10302–10309.



Mgr. Jan Novotný, Ph.D., který získal třetí cenu v kategorii publikovaných prací, při přednášce

Interpretace paramagnetických NMR spekter potenciálních Ru(III) metaloléciv: synergie mezi experimentem a relativistickými DFT výpočty

Jan Novotný, 3. cena v kategorii publikovaných prací

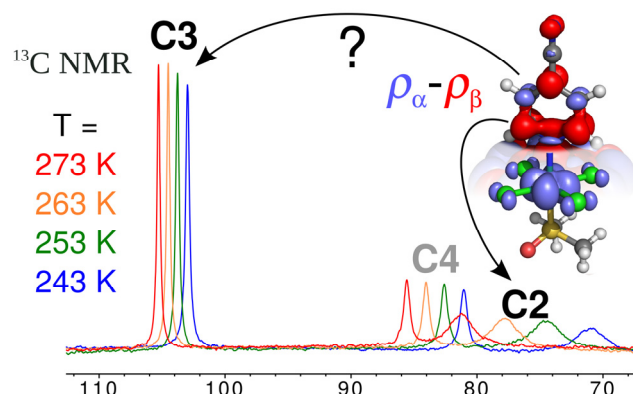
Tato práce se zabývá novými deriváty paramagnetických komplexů Ru(III) pomocí NMR spektroskopie a pokročilých výpočetních přístupů založených na teorii funkcionálu hustoty (DFT). Analogické molekuly jsou v současnosti intenzivně studovány vzhledem k jejich potenciálním antimetastatickým účinkům.¹ Cílem práce bylo přiřadit a vysvětlit naměřené hodnoty pNMR chemických posunů pomocí analýzy spinové hustoty, popsat efekt substituentu, solvatace a parametrů DFT výpočtů.²

Nasyntetizované komplexy o obecné struktuře $[trans\text{-RuCl}_4\text{-(DMSO)-(4-R-pyridin)}]^-$ (R=H, CN, Me, CF₃, COOH, Phe) byly podrobeny měření teplotně závislých ¹H, ¹³C NMR spekter za účelem určení hodnot paramagnetického a orbitálního příspěvku k celkovému NMR chemickému posunu. V případě paramagnetických sloučenin jsou experimentální možnosti NMR spektroskopie kvůli rychlé relaxaci jaderného spinu vlivem nepárového elektronu značně omezené. Jednoznačné přiřazení rezonancí je proto založeno na porovnání získaných hodnot orbitálního posunu s údaji naměřenými pro diamagnetický analog na bázi Rh(III) a především s vypočtenými hodnotami pomocí nakalibrované DFT metodiky.³

Teoretická část této práce zahrnovala kontrolu geometrických parametrů vzhledem ke strukturám pocházejícím z difrakční analýzy, vyhodnocení vlivu přítomnosti protiontu, implicitního modelu solventu i roli relativistických efektů včetně spin-orbitální interakce. Většina výpočtů byla prováděna na dvou komponentní úrovni. Díky spolupráci s autory kvantově chemického programu ReSpect byly vybrané systémy studovány i na plně relativistické úrovni, nově implementované analytické nástroje umožnily identifikovat molekulové orbitály klíčové pro propagaci spinové hustoty z rutheniového centra na atomy pyridinového ligandu.

Publikovaná práce demonstruje, jak lze analýzu elektronové struktury pomocí současných metod teoretické chemie využít k interpretaci experimentálních pNMR dat. Použitý výpočetní protokol poskytl velmi dobrou shodu s naměřenými daty s výjimkou signálu atomu H2. V případě tohoto jádra v bezprostřední blízkosti paramagnetického centra se projevil použitý aproximace teoretického modelu. Bezchybné přiřazení NMR rezonancí představuje stěžejní předpoklad pro úspěšné využití

NMR spektroskopie při studiu interakce potenciálních ruthenioých metaloléciv s molekulami nosičů i pro jejich charakterizaci předcházející případnému biologickému testování.



Obr.1 Výřez teplotně závislých ¹³C NMR spekter 4-kyanopyridinového derivátu. Signál atomu C4 vykazuje větší paramagnetický posun než atom C3, což koresponduje s vypočtenou distribucí spinové hustoty.

Literatura:

- 1) Gu, L.; Li, X.; Ran, Q.; Kang, C.; Lee, C.; Shen, J. *Cancer Medicine.*, **2016**; 5(10), 2850-2860.
- 2) Novotný, J.; Sojka, M.; Komorovsky, S.; Nečas, M.; Marek, R. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138 (27), 8432–8445.
- 3) Vícha, J.; Novotný, J.; Straka, M.; Repisky, M.; Ruud, K.; Komorovsky, S.; Marek, R. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, 17, 24944.



Také Ing. Lucie Habartová obdržela třetí cenu v kategorii publikovaných prací

Chiroptická spektroskopie v analýze reálných klinických vzorků

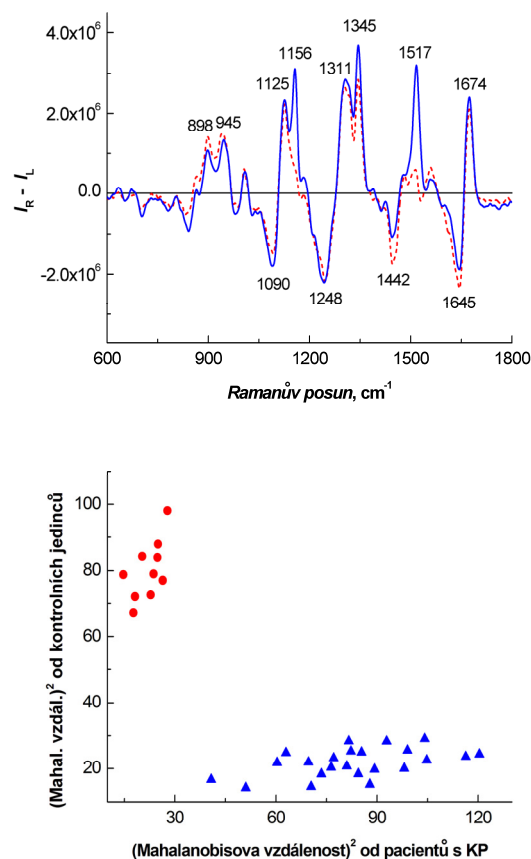
Lucie Habartová, 3. cena v kategorii publikovaných prací

Metody chiroptické spektroskopie jsou citlivé na trojrozměrnou strukturu chirálních molekul a jsou tudíž schopny identifikovat i jejich velmi malé konformační změny. Těto vlastnosti je hojně využíváno především v oblastech strukturní analýzy malých molekul, avšak doposud neexistovala žádná studie, která by se zabývala systematickým využitím chiroptické spektroskopie v analýze komplexních biologických vzorků obsahujících složité směsi chirálních molekul, jakými je například lidská krevní plazma.

Nejen nízké koncentrace tradičně sledovaných diagnosticky významných molekul, ale i obsah vysoce fluoreskujících molekul jsou limitujícími faktory pro spektroskopickou analýzu krevní plazmy. Především při využití Ramanovy spektroskopie a Ramanovy optické aktivity (ROA) je pozorováno natolik intenzivní fluorescenční pozadí, které zcela či z větší části překrývá požadovaný signál a tím analýzu značně limituje, až znemožňuje. Pro potlačení tohoto nepříznivého jevu byl v naší laboratoři vyvinut postup přípravy a analýzy vzorků krevní plazmy sestávající z filtrace vzorku membránou, přidavku zhašedla fluorescence, působení laserového záření a následné matematické úpravy zbytkové distorze spektrálního pozadí.¹ Tato metodologie umožnila první úspěšné pozorování projevů optické aktivity lidské krevní plazmy pomocí chiroptické spektroskopie.

Vyvinutý postup byl následně využit k analýze krevní plazmy pacientů trpících diabetem² a karcinomem pankreatu (slinivky břišní)³ s cílem identifikovat specifickou spektrální odezvu těchto závažných onemocnění a zachytit potenciální strukturní odlišnosti krevní plazmy pacientů a zdravých kontrolních jedinců na molekulární úrovni (obr. 1). Pro získání podrobnější strukturní informace byly využity chiroptické metody (ROA a elektronový cirkulární dichroismus) doplněny o analýzy konvenční Ramanovou a infračervenou spektroskopií. Ve všech výsledných spektrech byly identifikovány pásy charakteristické pro složky krevní plazmy, a to proteiny, lipidy či sacharidy apod. Zároveň byly pozorovány změny v intenzitách a průběhu některých spektrálních pásů, což s největší pravděpodobností souvisí s molekulárními projevy výše zmíněných chorob. Následná statistická analýza spektrálních dat poskytla rozlišení skupin pacientů zdravých kontrolních jedinců s vysokou správností

vzhledem ke klinické diagnóze studovaných jedinců (diabetes 95 %; karcinom pankreatu 88 %; po křížové validaci statistického modelu).



Obr. 1 Průměrná spektra Ramanovy optické aktivity krevní plazmy (nahore) a výsledek statistického zpracování spektrálních dat (dole) pro pacienty s karcinomem pankreatu (červená) a zdravé kontrolní jedince (modrá)

Protože v současné době neexistuje dostatečně selektivní a specifická metoda pro diagnostiku časného stádia karcinomu pankreatu ani pro dřívější odhalení diabetu, jeví se chiroptická spektroskopie jako vhodný nástroj pro sledování specifických změn především ve struktuře plazmatických biomolekul, ke kterým vlivem onemocnění dochází. V některých případech se podařilo prokázat přítomnost onemocnění spektrálními metodami dříve než zavedenými diagnostickými postupy. Na základě výsledků dosažených v pilotních studiích je tedy možno usuzovat, že chiroptická spektroskopie má potenciál stát se podpůrným a doplňkovým nástrojem pro diagnostiku některých závažných onemocnění.

Literatura:

1) Tatarkovič, M.; Synytsya, A.; Šťovíčková, L.; Bunganič, B.; Miškovičová, M.; Petruželka, L.;

Setnička, V. *Anal. Bioanal. Chem.* **2015**, 407 (5), 1335.

2) Šťovíčková, L.; Tatarkovič, M.; Logerová, H.; Vavřínek, J.; Setnička, V. *Analyst* **2015**, 140 (7), 2266.

3) Bunganič, B.; Šťovíčková, L.; Tatarkovič, M.; Kocourková, L.; Suchánek, Š.; Frič, P.; Setnička, V.; Zavoral, M. *Gastroent. Hepatol.* **2015**, 69 (6), 518.



Blahopřání MSc. Michaelu Grebeňovi ke třetí ceně v kategorii publikovaných prací

Advanced optical spectroscopy of semiconductor nanostructures.

Michael Greben, 3. cena v kategorii publikovaných prací

Due to its unique properties, the semiconductor nanomaterials already found some applications in sensing devices, bio-medical sciences, and various industries (including electronics, optoelectronics, chemical technology, textile industry, etc.). The most attractive feature of nanostructures is the possibility of tuning their electronic (and consequently optical and other) properties by changing their size and shape – so called quantum confinement effect. Though recent spectroscopic studies provided good qualitative understanding of the optical properties of nanomaterials, precious quantitative characterization is often missing. In case of photon-excited nanostructures (useable as detectors, absorbers in solar cells, or LEDs etc.), a crucial optical properties are the ability to efficiently absorb light (most often described by the absorption cross-section (ACS) of a nanoobject) or emit light (could be characterized by photoluminescence quantum yield (PL QY)). Therefore, we have developed and improved two special optical spectroscopy methods for advanced characterization of semiconductor nanomaterials. Namely (i) absolutely calibrated PL QY measurements under variable excitation photon

energies^{1,2} and (ii) ACS measurements via the power-dependent PL-kinetics.³

The first part of work is devoted to PL QY study that we have done on both (a) liquid (colloidal PbS quantum dots (QDs) in toluene)¹ and (b) solid (Si NC/SiO₂ multilayers)² samples. All experiments were done with a home-made spectroscope coupled to an integrating sphere (IS) that was absolutely calibrated with a method we have proposed and tested⁴. Our purpose was to study PL QY dependence on the excitation photon energies, concentration (inter-nanocrystals (NC) distance), QD size (a), conditions of storage (a) and temperature (b). Using a large set of LEDs for PL excitation we demonstrated that PL QY of semiconductor QDs is a function of excitation wavelength and pointed out the importance of PL QY detection over a broad excitation spectral range instead of just one or a few excitation wavelengths. The abnormal concentration dependence of PL QY (a) was registered for very small concentrations of colloidal QDs that gave us an idea that surface modifications of QDs caused by ligand desorption and oxidation are responsible for it. In case of solid samples it's more convenient to talk about inter-NC distance rather than NC concentration. We detected doubling of the PL QY value at room temperature by varying the thickness of vertical barrier layers from 1 to 2 nm or larger. The temperature evolution of PL QY helped us to suggest that the PL QY changes are due to a thermally activated transport of excitation into non-radiative centers in dark NCs or in the matrix.

The second part of work is dedicated to ACS study³ of nanostructures. After detailed analysis of the PL-modulation technique we propose an improved experimental procedure which enables simpler implementation of this method to determine ACS of various (nano)materials in both solid and liquid states. The direct comparison of ACS values obtained by the PL technique and independent absorption method gave us consistent results for Si NCs (Fig.1).

Thus, capabilities of our techniques were demonstrated by studying different semiconductor nanostructures that could have great practical significance in their optical characterization. One of the advantage is that once ACS have been quantified using introduced technique, it enables us to establish ensemble QD concentrations that is crucial to subsequent device applications. The obtained quantitative parameters could be used in theoretical modelling of light interaction with matter, comparative analysis of materials or device fabrication processes.

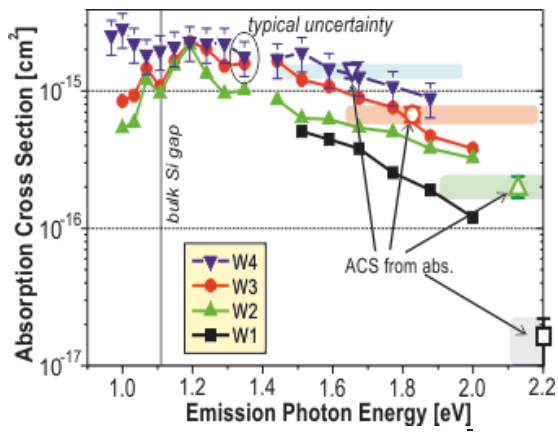


Fig.1 ACS of Si NC/SiO₂ multilayers³

Literatura:

- 1) Greben, M.; Fucikova, A.; Valenta, J. *J. Appl. Phys.* **2015**, 117, 144306.
- 2) Valenta, J.; Greben, M.; Gutsch, S.; Hiller, D.; Zacharias, M. *Appl. Phys. Lett.* **2014**, 105, 243107.
- 3) Valenta, J.; Greben, M.; Remes, Z.; Gutsch, S.; Hiller, D.; Zacharias, M. *Appl. Phys. Lett.* **2016**, 108 (2), 23102.
- 4) Valenta, J.; Greben, M. *AIP Advances* **2015**, 5, 047131.

FTIR, NIR A RAMANOVY SPEKTROMETRY A MIKROSKOPY



DLOUHÁ ŽIVOTNOST | VÝKONNOST | ŠIROKÁ NABÍDKA PŘÍSLUŠENSTVÍ | JEDNODUCHÁ OBSLUHA

Z naší nabídky vybíráme:

VERTEX FM

Od MIR do FIR jedním měřením

- Unikátní rozsah 50–6000 cm^{-1} bez výměny komponent
- Rozšíření pro výkonný R&D spektrometr VERTEX 70
- Kombinace širokospektrálního detektoru a děliče paprsků
- RockSolid™ – robustní, vysoce výkonný interferometr
- Možnost profukování a vakua pro eliminaci atmosférických vlivů
- Využití v geologii, anorganické a organometalické chemii a dalších
- ATR knihovna pro kompletní MIR a FIR spektra



BRAVO

Ruční Raman nové generace

- Vysoká citlivost
- Unikátní potlačování fluorescence technologií SSE™
- Excitace dvěma lasery Duo LASER™
- Využití ve farmacii, mineralogii, restaurátorství a dalších
- Intuitivní dotykové ovládání
- Vzdálené ovládání i propojení s PC pomocí Wi-Fi
- Nízký výkon laseru nepoškodí vzorek (1M třída)
- Dostupné knihovny



www.brukeroptics.cz



HPST, s.r.o.
Písnická 372/20
142 00 Praha 4
Česká republika

Tel.: +420 244 001 231
Fax: +420 244 001 235
E-mail: info@hpst.cz
Web: www.hpst.cz

Autorizovaný
distributor
Agilent
Technologies



Agilent Technologies

Authorized Distributor

4210 MP-AES

PRVKOVÁ ANALÝZA, KTERÁ BĚŽÍ NA VZDUCH

- **Vyšší výkon**
lepší citlivost, lineární dynamický rozsah, detekční limity a rychlost analýz v porovnání s technikou plamenové AAS
- **Robustní mikrovlnné plazma**
zvládá i složité matrice jako oleje, paliva, organické matrice, geochemické vzorky, hnojiva či potraviny
- **Nízké provozní náklady**
běží na vzduch, nepotřebuje acetylén ani oxid dusný
- **Bezpečná laboratoř**
nepotřebuje žádné hořlavé plyny ani tlakové lahve
- **Jednoduchý start**
přednastavené metody a automaticky vycentrováný hořák zaručí rychlý rozjezd nového stroje



www.agilent.com/chem/4210mp-aes

Vyžádejte si cenovou nabídku na Agilent 4210 MP-AES a zašleme Vám malý dárek!
Kontaktujte našeho produktového specialistu Ing. Jana Marka (jan.marek@hpst.cz).
Do poptávky uveďte **kód akce**: 9F_1701_CZMPAES_AD_EI.



plynová chromatografie ICP-OES příprava vzorku
elementární ANALÝZA elektrochemie SEA
analýza povrchů separační techniky
DVS REOLOGIE ATOMOVÁ spektroskopie
GC temperace kapalinová chromatografie
UV-VIS spektrometrie GC-MS lyofilizátory
konfokál B.E.T. LIMS MIKROSKOPIE koncentrátory
CHNSO analýza AAS analýza částic HPLC
hmotnostní SPEKTROMETRIE centrifugy EXTRUZE
ICP-MS SERVIS termická analýza AIR monitoring
XPS widefield TEXTURA spotřební materiál NMR
DLS automatické dávkování iGC TOC analýza RVC

www.pragolab.cz



SPECTRO CS s.r.o.

Certifikace dle ISO 9001: 2009, Certifikát TÜV SÜD Czech číslo: 05.094.716-1
 Rudná 1361/51, 700 30 Ostrava – Zábřeh, Tel: +420 596 762 840, Fax: +420 596 762 849, info@spectro.cz, www.spectro.cz



specialisté v oboru spektrometrie nabízejí přístroje firem:



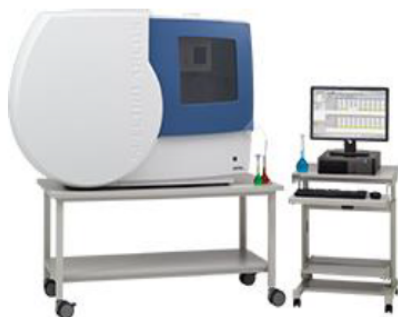
Ruční a mobilní spektrometry	Jiskrové spektrometry	ED - RTG spektrometry	ICP-OES spektrometry	ICP-MS spektrometry	Příprava materiálu pro RTG
Analyza v terénu, RTG a jiskrové/obloukové přístroje	Analyza kovových materiálů	Analyza pevných, kapalných a práškových materiálů	Analyza roztoků pro ultra nízké limity detekce	Plně simultánní MS spektrometr	Tavičky, lisy, mlynky, spotřební a referenční materiály pro XRF
Referenční materiály	Automatické systémy	GD spektrometry	Analyzátory ořezových kovů	Ruční IČ spektrometry	Analyzátory částic
Referenční materiály všeho druhu od firmy MBH	Kontejnerová laboratoř na klíč od firmy FLSmidth	Hluboká analýza materiálu Distribuce prvků dle hloubky	Přístroje pro prediktivní údržbu pomocí analýzy olejů a maziv - kompletní zařízení pro tribotechnickou analýzu - na požádání zašleme podrobné informace		

Zastoupení na Slovensku: SPECTRO APS spol. s r.o., Izabely Textorisovej 13, 036 01 Martin, www.spectroaps.sk

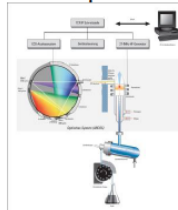
ICP spektrometr SPECTRO ARCOS Vlajková loď firmy SPECTRO

Jedná se o nový model (2015) ICP spektrometru, který je nástupcem velice úspěšného původního ICP spektrometru SPECTRO ARCOS, jenž se osvědčil zejména při analýze těžkých a komplikovaných matic (podle sloganu „tam kde ostatní končí, my začínáme...“).

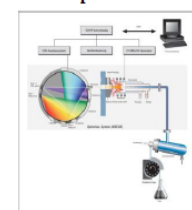
Přístroj se vyrábí jak s axiálním, tak s radiálním snímáním plasmy:



Radiální pohled - SOP



Axiální pohled - EOP

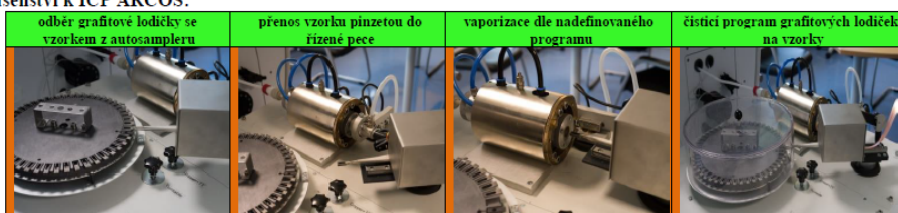


a nově i v provedení MULTI VIEW.

MULTI VIEW je systém s kombinací axiálního a radiálního pohledu, který na rozdíl od systému DUAL VIEW nabízí oba pohledy v plnohodnotné kvalitě. Přístroj s DUAL VIEW je v podstatě vždy zařízení s axiálním pozorováním doplněné o radiální pohled, který však nemá nejlepší parametry. Naproti tomu náš systém MULTI VIEW vám skutečně nabízí dva plnohodnotné přístroje v jednom. Tím si zajistíte neomezené možnosti jeho použití v široké škále aplikací, od pitných vod přes matrice půd, kalů až po složité analýzy kovových vzorků, zasolených roztoků, skla, drahých kovů atd. Přístroj je ovládán příjemným analytickým SW, analýza je rychlá (sken za 3 sekundy) a nezávislá na počtu zvolených čar a prvků při velmi dobrém stabilním rozlišení. Provoz spektrometru je velmi ekonomický bez nároku na další spotřebu argonu, klimatizaci laboratoře, externí chlazení vodou apod.

Díky tomu, že spektrometr umožňuje simultánní měření a zpracování tranzientního signálu (závislost intenzity na čase) pro libovolný počet čar a prvků, je vhodný pro spojení se vstupním vnašecím zařízením pro rychlé děje jako je laserová ablace, elektrotermická vaporizace (ETV) apod., a tím poskytuje možnost analyzovat mikromnožství pevných vzorků bez nutnosti převádění do roztoku!

ETV jako příslušenství k ICP ARCOS:



NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

2. Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2012 - sborník přednášek na CD	199,- Kč
Škola luminiscenční spektrometrie 2011 - sborník přednášek na CD	199,- Kč
Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2010, sborník přednášek na CD	199,- Kč
Inorganic Environmental Analysis	161,- Kč
Referenční materiály (přednášky)	93,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
Kurz ICP pro pokročilé	245,- Kč
5. kurz ICP spektrometrie 2009	350,- Kč
6. kurz ICP spektrometrie 2011	350,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
Metodická příručka pro uživatele FTIR	149,- Kč
Skripta Kurz HPLC/MS (2001)	100,- Kč
12. Spektroskopická konference	190,- Kč
13. Spektroskopická konference (2007 Lednice)	130,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '03	62,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '04	78,- Kč
AAS II – kurz pro pokročilé (2006)	435,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '05	126,- Kč

Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

se sídlem: Thákurova 7, 166 29 Praha 6 e-mail: immss@spektroskopie.cz
<http://www.spektroskopie.cz>

Adresa pro zasílání korespondence: Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2,
611 37 Brno

Adresa sekretariátu pro osobní kontakt: Univerzitní kampus Bohunice, pavilon A14

Úřední hodiny: úterý 10 – 12 h, čtvrtek 10 – 12 h

Telefon: 549 49 1436, fax: 549 49 2494, mobil: 722 554 326, tajemník Tomáš Vašina

redakční rada:

prof. RNDr. Josef Komárek, DrSc. (předseda)
prof. Ing. Josef Čáslavský, CSc., prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc.
tech. redakce: Mgr. Rostislav Červenka, Ph.D.

redakční uzávěrka: 9. 1. 2017

uzávěrka příštího čísla: 6. 4. 2017