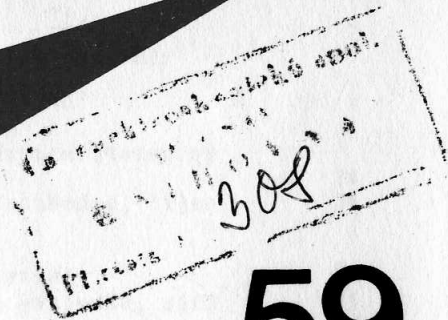


Československá spektroskopická společnost
ČESKOSLOVENSKÁ SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST

Bulletin



59
1989

B u l l e t i n
Čs.spektroskopické společnosti

Číslo 59	prosinec 1989
Z obsahu 59.čísla Bulletinu :	str.
Zprávy ze Společnosti	2
Sekce molekulové spektroskopie :	
OS spektroskopie pevného stavu	
- R.Grasser : Optical Properties of Tungstates	5
- Y.Iguchi : External Photoelectric Emission in the Soft X-Ray Region and Its Application to Spectroscopy	6
- Y.Iguchi : Reflectivity, Absorption and Optical Constants of Some Optical Materials in the Soft X-Ray Region	6
- I.Pelant : Luminiscenční spektra příměsí křemíku	7
OS magnetické rezonanční spektroskopie	
- XVI.seminář EPR, květen 1989	7
- 19.seminář NMR, říjen 1989 (přehled resumé)	7
Sekce speciálních spektroskopických metod :	
OS elektronové a iontové spektroskopie	
- W.Steinmann : Spectroscopy of Surface States by Two-Photon-Photoemission	24
- Podzimní škola elektronové spektroskopie, říjen	24
Komise	
Komise pro standardy a referenční materiály	
Seminář RM a jakost analytických výsledků, září	25
Komise přístrojová	
Seminář FLAPHOvar, říjen	26
Informace	26
Referáty	
XIX.EUCMOS (M.Závětová, K.Volka)	27
Prof.Ing.Eduardu Plškovi, DrSc k šedesátinám	29

Zprávy ze Společnosti

Ve 4.čtvrtletí 1989 se konaly 4 schůze předsednictva hlavního výboru Společnosti. Na programu byla příprava programu 48. schůze hlavního výboru a volebního valného shromáždění, ekonomická problematika Společnosti, vypracování návrhů na udělení plakety Jana Marca Marci za r. 1989 Dr.Hermanovi a Doc.Eckertové (mimořádně již v r. 1989 k životnímu jubileu), zahraniční spolupráce, soutěž mladých spektroskopiků a ediční činnost Společnosti.

Dne 4.12.1989 se konala v NTM v Praze od 10.00 do 12.30 hod 48.schůze hlavního výboru Společnosti. Z jejího programu uvádíme nejdůležitější body jednání :

- Ing.Kosina přednesl zprávu o hospodaření a zdůvodnil nutnost zavedení úsporného režimu v r.1990, aby Společnost hospodařila i nadále bez dotace, s čímž členové hlavního výboru jednomyslně souhlasili
- Z hlediska vývoje událostí po 17.listopadu byla znovu prodiskutována kandidátka hlavního výboru Společnosti pro navazující volební valné shromáždění. Hlavní výbor nepřijal návrh Dr.Mráze, jímž se vzdal vlastní kandidatury na místo předsedy Společnosti. V diskusi členové hlavního výboru vyslovili Dr.Mrázovi důvěru a zdůraznili zejména jeho zásluhu na tom, že ve Společnosti mohla pracovat řada vědeckých pracovníků, kteří byli na vlastních pracovištích persekvoováni a pro mnohé zůstaly akce Společnosti jedinou možností profesního kontaktu se zahraničím.
- Byl schválen návrh na ustavení sboru konsultantů hlavního výboru, jehož posláním bude spolupracovat na plánu odborné činnosti, při uzavírání mezinárodních dohod a při dalších činnostech hlavního výboru
- Bylo provedeno vyhodnocení soutěže mladých spektroskopiků za r. 1989 a po diskusi, kterou řídila vedoucí školské komise Dr.Čermáková, rozhodl hlavní výbor o udělení cen :

I.cena : nebyla udělena

II.cena : Dr.Vladimíru Anděrovi za práci "Studium systému rhodia dispergovaného na podložkách uhlíku a TiO_2 metodou fotoelektronové a Augerovy elektronové spektroskopie"

II.cena : Dr.Ivanu Jirkovi za práci " Studium Cu klastru na uhlíku metodou ESCA"

III.cena : Ing.Marcelovi Miglierinimu za práci "Justification of various fitting profiles for Mössbauer spectrum analysis of metallic glasses"

- Dr.Fara referoval o ediční činnosti a možnosti úspor v této oblasti. Upozornil, že o dotisk Bulletinu č.57 projevila zájem Laboratoř optické spektrometrie s vysokým spektrálním a časovým rozlišením Karlovy university
- Ing.Hulínský přednesl návrhy na udělení plakety Jana Marca Marci Dr.Hermanovi a Doc.Eckertové; návrhy byly jednomyslně schváleny.
- Dr.Rubeška přednesl plán činnosti na r. 1990, v němž jsou zařazeny i 2 akce se spolupředstavením : Výběrový seminář k životnímu jubileu Prof.Mathernyho a Seminář věnovaný aplikacím doutnavých výbojů v průmyslové spektrální analýze. Celkem má Společnost v plánu na r. 1990 12 vícedenních akcí.
- Dr.Fara přednesl návrh stanoviska Společnosti k událostem 17.listopadu, který připravil s Dr.Čermákovou, Dr.Ryskou a Dr.Závětovou. Stanovisko bylo jednomyslně schváleno.

Volební valné shromáždění se konalo v přednáškové síni NTM v Praze dne 4.12.1989 od 13 hod. Po zahájení a ustavení volební komise byly předány plakety Jana Marca Marci Ing.B.Schneiderovi, DrSc a Dr.Z.Hermanovi, CSc a dále byly předneseny zprávy o odborné činnosti, o hospodaření a zpráva revisní komise. Shromáždění udělilo absolutorium odstupujícímu hlavnímu výboru a po přestávce, během níž byly provedeny volby nového hlavního výboru tajným způsobem, přednesl Prof.Plško přednášku.

Dne 14.12.1989 se konala schůze předsednictva hlavního výboru, na níž byli nově zvoleni členové hlavního výboru jmenováni do funkcí :

předseda	RNDr.Jan Mráz
I.místopředseda	Ing.Vladimír Streško, CSc
II.místopředseda	Ing.Karel Volka, CSc
vědecký tajemník	RNDr.Ivan Rubeška, CSc
hospodář	Ing.Dana Koliňová, CSc
organizační tajemník	RNDr.Miroslav Ryska, CSc
referent pro zahraniční styky	Ing.Zdeněk Kosina, CSc
redaktor	RNDr.Milan Fara, CSc
revisní komise	Ing.Světla Křišťoufková Ing.Petr Krňák, CSc Ing.Věra Spěváčková, CSc
předseda sekce optické atomové spektroskopie	RNDr.Josef Musil
předseda sekce molekulové spektroskopie	RNDr.Štěpán Urban, CSc
předseda sekce speciálních spektroskopických metod	Ing.Václav Hulínský, CSc
předseda sboru konsultantů	Prof.Ing.Eduard Plško, DrSc

členové výboru

RNDr.František Caňo
 RNDr.Ludmila Čermáková, CSc
 Ing.Zdeněk Čížek, CSc
 Ing.Karol Flórián, CSc
 RNDr.Zdeněk Herman, CSc
 Ing.Václav Chlan, CSc
 RNDr.Jana Kubová, CSc
 Ing.Martin Nikl, CSc
 RNDr.Ivan Novotný, CSc
 Ing.Ivan Obrusník, CSc
 RNDr.Václav Sychra, CSc
 Ing.Dalibor Tluchoř

členové sboru konsultantů

RNDr.Milan Horák, CSc
 Doc.Ing.Zbyněk Ksandr, CSc
 RNDr.Josef Kuba, CSc
 Ing.Jaromír Moravec, CSc
 RNDr.Alena Špačková, CSc
 RNDr.Jaroslava Waňková, CSc
 RNDr.Milena Závětová, CSc

Přehled vedoucích odborných skupin a komisíorganizační výbor sekce
optické atomové spektroskopie

RNDr.Josef Musil
 Ing.Karol Flórián, CSc
 Ing.Václav Chlan, CSc
 Ing.Dana Koliňová, CSc
 RNDr.Jana Kubová, CSc
 RNDr.Zdeněk Slovák, CSc

OS vibrační spektroskopie
 OS elektronové spektroskopie
 a fotochemie
 OS magnetické rezonanční
 spektroskopie
 OS spektroskopie pevného stavu

RNDr.Bohuslav Strauch, CSc
 Ing.Miloš Nepraš, DrSc
 RNDr.Miroslav Holík, CSc
 RNDr.Jan Polecha, CSc

OS rentgenové spektrometrie
 OS lokální elektronové
 mikroanalýzy
 OS hmotnostní spektrometrie
 OS instrumentálních radio-
 analytických metod
 OS Mössbauerovy spektroskopie
 OS elektronové a iontové
 spektroskopie

RNDr.Václav Macháček
 Ing.Václav Hulínský, CSc
 RNDr.Miroslav Ryska, CSc
 Ing.Ivan Obrusník, CSc
 Ing.Oldřich Schneeweiss, CSc

Komise přístrojová

RNDr.Josef Zemek, CSc
 Ing.Martin Nikl, CSc
 Ing.Jiří Doležal, CSc
 Ing.Dalibor Tluchoř
 RNDr.Ludmila Čermáková, CSc

Komise školská
 Komise pro standardy a
 referenční materiály
 Komise životního prostředí

Ing.Jan Kučera, CSc
 Ing.Petr Püschel
 RNDr.Miroslav Ryska, CSc
 RNDr.Petr Pracna, CSc
 Prof.Ing.Eduard Plško, DrSc

Komise názvoslovná

SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE

OS spektroskopie pevného stavu

uspořádala ve 3.čtvrtletí 1989 celkem 3 schůze, které odborně připravila její vedoucí Dr.M.Závětová, CSc.

Dne 16.8.1989 byla na programu přednáška Dr.R.Grassera (I.Physikalisches Institut der Justus-Liebig-Universität Giessen) na téma Optical properties of tungstates.

V přednášce byly prezentovány výsledky měření reflexních spekter CaWO_4 a CaMoO_4 ve spektrální oblasti 4 - 25 eV a provedena diskuse na základě srovnání se semiempirickými výpočty přechodů v aniontových komplexech (metodou molekulárních orbitů). Z měření absorpčních a fotoluminiscenčních spekter a kinetiky emise čistého CaWO_4 a CaWO_4 dopovaného olovem, vyplývá že pouze modrý emisní pás WO_4 v blízkosti 435 nm má intrinsickou podstatu a patří neporušeným WO_4^{--} komplexům. Zelená luminescence (536 nm) je připisána defektům WO_3 a červená emise vyšším komplexům W. Dále bylo zjištěno, že emisní pás u 468 nm krystalu CaWO_4 :Pb patří WO_4^{--} komplexům, které jsou stabilisovány ionty Pb^{++} .

Ve dnech 11. a 12.9.1989 uspořádala odborná skupina dvě přednášky prof.Dr.Yasuo Iguchi z University of East Asia, Yamaguchi, Japonsko :

- 1) External Photoelectric Emission in the Soft X-Ray Region and Its Application to Spectroscopy
- 2) Reflectivity, Absorption and Optical Constants of Some Optical Materials in the Soft X-Ray Region

Prof.Iguchi graduoval v roce 1977 na Tokyo University of Education, kde od roku 1964 pracoval. Od roku 1977 učil a pracoval na Tsukuba University a od roku 1987 je profesorem na University of East Asia.

Je experimentálním fyzikem, zabývá se jak stavbou exp.zařízení (VUV a měkká rtg. spektrální oblast, jak klasické zdroje, tak využití synchrotronového záření - zejména na univerzitách

v Tsukubě a Hirošimě), tak metodami měření a vyhodnocování reflexních a absorpčních spekter pevných látek, fotoelektronovou emisí apod.

Své zkušenosti, zejména s využíváním synchrotronových zdrojů, na naše vyžádání shrnul ve dvou přednáškách, které během svého pobytu proslovil. V diskusích po přednáškách zodpověděl detailní konkrétní dotazy členů OS spektroskopie pevného stavu.

Během pobytu došlo na otázky týkající se spolupráce při řešení vědeckých problémů. Pro čs.stranu by byla zejména atraktivní možnost účastnit se měření na některém z japonských synchrotronů. Zjišťuje se možnost vyslání mladého pracovníka na stáž. Prof.Iguchi slíbil poslat informace o organizaci spektroskopiků v Japonsku.

Na žádost pořadatelů připravil Prof.Iguchi následující stručná resumé svých přednášek.

Yasuo Iguchi, University of East Asia, Yamaguchi, Japonsko : External Photoelectric Emission in the Soft X-Ray Region and Its Application to Spectroscopy

The external photoemission is realized by the following three steps :

1. Penetration of soft x-rays into a solid and excitation of core electrons.
2. Travelling and scattering of the photoelectron.
3. Escape of the photoelectron and scattered electrons over surface potential barrier into the vacuum.

According to the three step model, the photoelectric yield is

$$\eta_i = (1 - R_i) \cdot B \frac{\mu_{eff}}{\mu_{eff} + 1/L} \quad (i = s, p)$$

and

$$L \cdot \mu_{eff} \ll 1$$

in the soft x-ray region. Thus

$$\eta_i \sim B \cdot L \cdot \mu_{eff}$$

Band L are slowly varying functions of photon energy. Therefore, the photoelectric yield spectrum in the soft x-ray region is closely similar to the corresponding absorption spectrum.

Numerical calculation of the relative photoelectric yield of CsI is shown as an example.

Experimental apparatus shown are two laboratory light sources and a Vodar monochromator, and synchrotron radiation source and a grasshopper monochromator.

Applications are shown on SiO₂ polymorphs, orthosilicates, BeO, BeF₂, and BeCu to verify the photoelectric yield spectroscopy.

Yasuo Iguchi, University of East Asia, Yamaguchi, Japonsko : Reflectivity, Absorption and Optical Constants of Some Optical Materials in the Soft X-Ray Region

The correspondence of the absorption spectra with electronic band structures and density of states, transition probability effects, and ligand field effects are shown on the soft x-ray

absorption spectra of Ni, NiO, alkaline halides, BaF₂, La compounds, In, Sn, Sb, and Te.

The way of determination of optical constants of CsI by using compiled wide range absorption data is shown. This is an adaptation of the Kramers-Kronig Transformation. An example of the determination of optical constants from reflectivity data is shown on the case of a MAS-1 steel mirror.

Furthermore, optical constants of SiC, TiC, and WC mirrors obtained from reflectivity data are shown.

Dne 27.9.1989 byla na programu schůze odborné skupiny přednáška

Ivan Pelant, Katedra chemické fyziky MFF UK, Praha : Luminiscenční spektra příměsí křemíku

Přednáška se zabývala luminiscencí excitonů v křemíku a jejího využití pro kvalitativní a kvantitativní analýzu mělkých donorů a akceptorů. Stručně byly diskutovány základní fyzikální představy o mechanismu zářivé rekombinace volných a vázaných excitonů i jejich komplexů a vyloženy základy analytické metody pro stanovení koncentrace bóru a fosforu v křemíku. Byly uvedeny výsledky získané v nízkoteplotní laserové luminiscenční laboratoři na KCHF MFF UK v Praze. Dále byla stručně prezentována spektra termodonorů a tzv. magnetického křemíku. Bylo provedeno srovnání luminiscenční spektroskopie křemíku s jinými optickými analytickými metodami. Luminiscenční spektroskopie v případě Si je velice perspektivní metoda, která se uplatní i u vysoce čistých materiálů (10^{12} - 10^{11} příměsí/cm³), kde jiné diagnostické metody selhávají.

Po přednášce M.Závětová oznámila členům odborné skupiny, že 31.12.1989 předává svou funkci vedoucího odborné skupiny spektroskopie pevného stavu RNDr.Janu Polechovi, CSc (zástupkyní bude RNDr.Kateřina Kokešová, oba jsou z Fyzikálního ústavu ČSAV, pracoviště Cukrovarnická).

OS magnetické rezonanční spektroskopie

uspořádala ve spolupráci se Slovenskou chemickou společností a Katedrou fyzikální chemie CHTF SVŠT v Bratislavě XVI. EPR seminář, který se uskutečnil v Pezinskej Babe od 23. do 25.5.1989 za účasti 30 odborníků. V rámci semináře se uskutečnila i 35. pracovní schůze odborné skupiny. Akci připravil a řídil Ing.A.Staško, DrSc.

Odborná skupina uspořádala dále ve dnech 18. - 20.10.1989 ve Valticích 19.seminář NMR, jehož se zúčastnilo 52 odborníků. Seminář se zaměřil především na automatizovanou přípravu a výměnu vzorků, počítačovou interpretaci spekter a data banky, evidenci vzorků a archivování výsledků a na využití NMR spektrometru jakožto detektoru průběhu reakce nebo chromatografického dělení. Odeznělo celkem 29 přednášek, z nichž dále přinášíme resumé.

Na semináři informoval Ing.M.Králík z Tesly Brno o vývoji čs.supravodivého spektrometru a zástupci firmy Bruker AG(NSR) pp.Schneiders a Dworak o automatizaci měření pomocí čarového kódu a o novinkách programového vybavení pro NMR. V rámci semináře se dne 19.10. uskutečnila i 36.pracovní schůze OS, na níž byli přítomní seznámeni s odbornými akcemi v tuzemsku i v zahraničí v roce 1990 a dále proběhla diskuse k využití osobních počítačů v NMR laboratoři.

Seminář i schůzi OS odborně připravil její vedoucí Dr.Miroslav Holík, CSc.

Radovan Fiala, Ústav analytické chemie ČSAV, Brno, Zenon Starčuk, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Potlačení signálu rozpouštědla v metodách 2D NMR

Příspěvek se zabývá potlačením signálu rozpouštědla ve fázově citlivých 2D spektrech. Konkrétní pozornost je věnována možnostem aplikace semiselektivních sekvencí s využitím spin-locku (SL) pro zajištění čisté fáze |1| v metodách NOESY, HOHAHA a ROESY.

Použití semiselektivní sekvence, která zajišťuje buzení spektra pouze mimo rezonanci, má obecný tvar $(sel)_x-(nsl)_x-SL_y$. Konkrétní tvar excitačního spektra závisí na selektivní části. Vhodným kompromisem mezi požadavky na jednoduchost sekvence a příznivý průběh excitace se ukázala sekvence $(1-2-2)_x-(5)_x$.

Délka selektivní části je příčinou fázové modulace. I když tato modulace ovlivňuje jen úzkou část spektra blízko rezonance, není možno SL vynechat, protože by se tím nepříznivě ovlivnil průběh excitace v blízkosti rezonance.

Pro potlačení vody v 2D sekvencích je nutno řešit otázku, které pulsy v sekvenci nahradit semiselektivním buzením. Zde je třeba vycházet jak z principu příslušné 2D metody, tj. ze stavu spinového systému v daném okamžiku, tak z charakteru použité semiselektivní budící sekvence. Z experimentálního hlediska hrají významnou roli praktické možnosti přístrojové techniky.

Nejsnadněji se potlačení rozpouštědla aplikuje v metodě MOESY, kde se dosahuje zpravidla nahrazením posledního "čtecího" pulsu semiselektivních sekvencí. Magnetizace je před tímto pulsem ve směru osy z , a tak je situace téměř stejná jako v 1D. Existují dva důvody, proč uvažovat o nahrazení i prvního pulsu v sekvenci : odstranění signálů vznikajících v důsledku chemické výměny a omezení možnosti vzniku radiačního tlumení.

Směšovací interval v HOHAHA byl použit ve formě TRIM-MLEV17-TRIM, kde jako TRIM puls byl použit krátký SL. V tomto uspořádání jsou dvě možnosti zařazení semiselektivní excitace pro potlačení signálu rozpouštědla. Jednak je to nahrazení prvního pulsu semiselektivním buzením, jednak návrat magnetizace do $+z$ na konci sekvence a následující selektivní "čtení". Nahrazení prvního pulsu je jednodušší, je však třeba upravit vzájemné fázování SL a TRIM pulsů tak, aby nedocházelo ke vzniku SL echa. V druhém případě je nutné před selektivním "čtením" zařadit homospoil puls pro likvidaci zbytků transverzálních složek magnetizace.

V ROESY je situace analogická jako u HOHAHA, dlouhý SL puls ve směšovacím intervalu slouží současně k odstranění magnetizace

vody vzniklé relaxací během t_1 . Vzhledem k podstatně delšímu trvání SL během směšovacího intervalu než je tomu u TRIM pulsů v HOHAHA není problém vzniku SL echa tak kritický.

|1| Starčuk Z., Půček L., Fiala R., Starčuk Z., Jr. : J.Magn.Reson. 80, 344 (1988).

L. Půček, Z. Starčuk a V. Sklenář, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Využití nelineární excitace pro potlačení signálu rozpouštědla

Měření protonových NMR spekter roztoků biologických látek je spojeno s řadou problémů vznikajících z důvodu přítomnosti intenzivního signálu vody ve spektru. K řešení těchto problémů byla navržena škála různých metod |1|. Při studiu vyměnitelných protonů se ukazuje jako nejvýhodnější použití selektivních pulsních sekvencí excitujících pouze požadovanou část spektra. Hlavním nedostatkem těchto sekvencí je existence velkého fázového gradientu v naměřeném spektru, který vzniká v důsledku načítání ofsetově závislých precesí vektorů magnetizace během vývojových intervalů mezi jednotlivými pulsy sekvence. Odstranění fázového gradientu aplikací fázových korekcí vede ke zvlnění základní čáry a následným nežádoucím distorzím ve spektru.

V příspěvku jsou prezentovány dva nové postupy |2, 3| návrhu selektivních pulsních sekvencí generujících fázově čistá spektra. V prvním případě |1| je ukázáno, že aplikace 270° rotace vektoru magnetizace vede v selektivních pulsních sekvencích k úplné, nebo alespoň k výrazné eliminaci nežádoucího fázového gradientu. 270° modifikace symetrizované $1-t-\bar{1}-t-\bar{1}-t-1$ sekvence doplněné krátkým refokusačním intervalem představuje velmi efektivní pulsní sekvenci pro potlačení signálu vody, a to jak vzhledem k vysoké účinnosti potlačení, tak i k výslednému amplitudovému a především fázovému profilu. Druhý postup |3| kombinuje vlastnosti 270° rotace s vlastnostmi půlených selektivních amplitudově modulovaných rf. pulsů aproximovaných jako DANTE sekvence. Takto získané pulsní sekvence se vyznačují téměř ideálním amplitudovým a fázovým profilem. Navrhovaný postup je demonstrován na příkladu odvození pulsní sekvence $2.5-t-5-t-5-t-5-t-5-t-5-t-27.5-t-60-t-90-t-110-t/2-270-ACQ$, která zajišťuje plnou excitaci ($> 95\%$) v rozsahu 1-5 ppm s fázovými chybami menšími než $\pm 2.5^\circ$. Platnost získaných výsledků je v obou případech experimentálně ověřena měřením 400 MHz protonových spekter mM roztoků biologických látek rozpouštěných v 90% H_2O .

- |1| P.J.Hore, in "Methods in Enzymology" vol. "NMR in Enzymology" (N.J.Oppenheimer and T.L.James, Eds.), Academic Press, San Diego, California
 |2| L.Půček a V.Sklenář, J.Magn.Reson., v tisku
 |3| L.Půček, Z.Starčuk a V.Sklenář, J.Magn.Reson., v tisku

Karel Bartušek, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno:
Pulsní řízení spektrometrů nukleární magnetické rezonance

Současná spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) se vyznačuje rozsáhlým využíváním experimentálních technik, kládoucích vysoké nároky na časovou koordinaci činnosti obvodů NMR spektrometrů a úplnou automatizaci experimentu.

Časová koordinace činnosti obvodů spektrometru je zajišťována k tomu určenými obvody, označovanými jako generátory pulsních sekvencí (GPS), pulsní programátory, pulsní generátory apod. V literatuře je popsáno mnoho typů generátorů s různou složitostí a vnitřním uspořádáním.

Největší uplatnění mají v současné době hardwarové generátory s programovým řízením, u nichž jsou časové intervaly vytvářeny digitálně. Jednodušší systém tohoto typu GPS byl využit ve spektrometru FTNMR, vyvinutém v roce 1980 v ÚPT, protože velmi dobře splňoval požadavky, kladené na přesnost a reprodukovatelnost nastavení délek časových intervalů, na jejich počet v sekvenci i na počet výstupních signálů pro řízení činnosti spektrometru. Součástí GPS byl komunikační program, který operátorovi umožňoval jednoduše naprogramovat i poměrně složitou pulsní sekvenci. Princip činnosti a program pro zadávání pulsní sekvence byl předán do k.p. Tesla Brno.

S rozvojem nových metod především selektivního buzení a jejich aplikace v oblasti NMR tomografie byl GPS postupně rozšířen o obvody generující analogový modulační signál pro amplitudové tvarování vř. pulsů, generaci pulsů pro fázovou modulaci vysílače pseudonáhodným šumovým signálem a jejich synchronizaci s pulsní sekvencí.

GPS ve spektrometru 200 MHz má oproti předchozímu typu větší počet nezávislých výstupů a odlišné signály pro klíčování výkonových vysílačů. Princip činnosti zůstal nezměněn. Vzhledem ke kmitočtu referenčního signálu 10 MHz, vlastnostem použitých obvodů TTL a zvolenému obvodovému řešení časovače je časové rozlišení GPS 0.1 μ s a nejkratší nastavitelná délka každého časového intervalu 0.2 μ s. Maximální počet časových intervalů je 32 s možností cyklování vybraného sledu časových intervalů ve dvou nezávislých cyklech (max. 256 a 65000 cyklů). Počet nezávislých výstupů je 40.

Součástí GPS jsou ještě další obvody, a to zejména obvody generující klíčovací a referenční nf. signály pro vysílač a přijímač jaderné stabilizace magnetického pole, obvody generující signály pro fázovou modulaci vř. signálu pro účely širokopásmového dekaplinku, počítačem řízený dělič kmitočtu pro účely vzorkování měřeného NMR signálu, generátor pulsů pro fázovou modulaci vysílače pseudonáhodným šumovým signálem a obvody generující analogový modulační signál pro tvarování vř. pulsů.

Pro snížení šumu na výstupu širokopásmového přijímače spektrometru je třeba ovládat vysílač dvěma signály. První z nich, jehož nástupní hrana přichází o 2 μ s před nástupní hranou druhého klíčovacího signálu přičemž sestupné hrany obou signálů se shodují, se mění režim výkonového zesilovače. Z toho důvodu jsou signály na adresní sběrnici ADR a signál STB časově zpožděné o 2 μ s. Tím jsou také časově zpožděné všechny výstupní signály spektrometru.

GPS pracuje ve dvou režimech: v režimu programování a zadávání dat a v režimu činnosti.

V režimu programování a zadávání dat je GPS pasivní. Operátor komunikačním způsobem s počítačem vytváří žádanou pulsní sekvenci, která je uložena na disk. Významnou úlohu při programování pulsní sekvence má stavové slovo každého časového intervalu, které lze významově rozdělit na dvě části. První z nich je určena časovacím obvodům GPS a obsahuje informace o délkách časových intervalů, jejich cyklování a ukončení sekvence. Druhá z nich obsahuje data pro výstupy GPS, tj. řídicí signály pro spektrometr. Operátorem připravená data pulsní sekvence jsou před každým experimentem zapsána do GPS přes stykovou jednotku IMS-2, která využívá jedné primární adresy pro zápis do GPS a čtyři sekundární adresy pro zápis do jednotlivých paměťových bloků.

V režimu činnosti GPS po nastartování z řídicího počítače přebírá řízení experimentu s nejvyšší prioritou. Akumulační procesor počítače provádí sběr dat a o jeho ukončení informuje GPS. Po ukončení pulsní sekvence GPS předává řízení počítači a je připraven k novému převzetí dat z paměti počítače, která mohou být shodná s daty předcházející sekvence nebo mohou být požadovaným způsobem modifikována.

Výhodou současného řešení GPS je jeho universálnost, vysoká rychlost a vstup dat z počítače prostřednictvím universální sběrnice. Nevýhodou je však použití obvodů střední integrace, obvodová složitost a nezbytně nutná doba přenosu dat z počítače před každou pulsní sekvencí.

Perspektivy rozvoje GPS pro NMR spektrometry lze spatřovat v rozšiřování max. počtu časových intervalů a nezávislých výstupů, eliminování přenosu dat mezi počítačem a GPS, snižování počtu součástek a zvýšení hustoty integrace použitých obvodů. Tyto požadavky splní programový GPS, jehož základem je procesor počítače s rychlými paralelními výstupy a s programovatelným časovačem. Generátory tohoto typu umožní vytvářet stále složitější pulsní sekvence, které současný rozvoj měřících metod NMR vyžaduje.

Z. Starčuk, L. Půček, Z. Starčuk ml., R. Fiala, V. Sklenář, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno: Využití amplitudově modulovaných pulsů v širokopásmovém dekaplinku

V ^{13}C NMR spektroskopii vodných roztoků biologických makromolekul v silných magnetických polích může při širokopásmovém protonovém dekaplinku docházet k nežádoucímu ohřevu měřených vzorků, a to i v případě použití moderních dekaplovacích technik typu WALTZ. Sdělení dokumentuje, že dekaplovací sekvence, složené z kvalitních 180° amplitudově modulovaných pulsů, umožňují nekolidanásobně snížit nároky na vř. výkon potřebný k účinnému dekaplinku a tím zmenšit ohřev vzorků. Ve sdělení jsou diskutovány některé problémy, které jsou s aplikací amplitudově modulovaných pulsů pro širokopásmový dekaplink spojeny. Jedná se zejména o problémy vzniku modulačních pásem v měřených spektrech a metod jejich eliminace. Dosažené výsledky ukazují, že nově navržené sekvence 180° amplitudově modulovaných pulsů jsou vhodné pro širokopásmový dekaplink v kmitočtovém rozsahu 4 - 6 kHz.

Josef Halámek, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno :
Váhové funkce pro zúžení spektrálních čar

Váhových funkcí používaných v FT NMR spektroskopii pro zlepšení frekvenčního rozlišení je mnoho a přitom se objevují další (TRAFT). Schází však doporučení, kdy kterou funkci použít a jak optimálně volit parametry. Autoři se většinou spokojí presentováním grafických výsledků na zvoleném multipletu, někdy dokonce bez uvedení parametrů, takže není možné zpětné ověření.

Příspěvek obsahuje srovnání váhových funkcí používaných pro zúžení spektrálních čar. Srovnávají se tyto funkce : exponenciála, Gaus, TRAF, a sinus s exponenciálou. Srovnání je založeno na vyhodnocení relativního poměru S/N a zúžení. Zde jsou jednoznačně stanovena pravidla, kdy kterou váhovou funkci používat. Dále je rozebrán vliv váhových funkcí a jejich parametrů na tvar spektrální čáry a vliv zákmitů. Grafické vyhodnocení je provedeno na dubletu 1:1, pravidelném a nepravidelném multipletu. Při grafickém vyhodnocení multipletu se vychází ze stejného relativního poměru S/N pro různé váhové funkce. Jsou diskutovány nevýhody srovnání založeného na profíznutí multipletu až k nulové linii. Výsledky srovnání jsou shrnuty tak, aby je bylo možno využít pro volbu vhodné váhové funkce a jejich parametrů.

S. Uhrínová, D. Uhrín, T. Liptaj, CHTF SVŠT CL NMR, Bratislava : Optimalizácia 1D-COSY v prípade veľmi malých interakčných konštánt a rýchlo relaxujúcich spinových systémov

Prenosová funkcia 1D COSY experimentu

$$I_{AX} = \exp(-\tau_{eff}/T_{2A}) \sin \pi J_A \tau_{eff} \pi \cos \pi J_p \tau_{eff}$$

(J_A , J_p - aktívna resp. pasívna interakčná konštanta, τ_{eff} - efektívny vývojový čas, T_{2A} - relaxačný čas selektívne excitovaného protónu) nadobúda malé hodnoty, ak $J_A \ll 1$ Hz, alebo $T_{2A} < 100$ ms.

V prvom prípade nadobúda prenosová funkcia maximálnu hodnotu ak $\tau_{eff} = T_{2A}$. Vplyv pasívnych interakčných konštánt je nutné zohľadniť a maximálna funkcia $\pi \cos \pi J_p \tau_{eff}$ korelovať s hodnotou T_{2A} . Takto získaná hodnota τ_{eff} predstavuje súčasne polovicu optimálnej doby snímania ($\tau_{eff} = t_2/2$). Výsledné fázovo citlivé spektrum umožňuje rozlíšiť medzi signálmi pochádzajúcimi z veľkých resp. malých interakčných konštánt.

V prípade rýchlo relaxujúcich spinových systémov sa optimálna hodnota τ_{eff} určila z prenosovej funkcie I_{AX} na základe približnej znalosti J_A , J_p a T_{2A} . Získané antifázové multiplety boli analyzované pomocou DISCO metódy.

J. Miklovič, CL NMR CHTF SVŠT, Bratislava : Selektívne excitácie frekvenčne modulovanými kompozitnými impulzmi

V práci sme študovali výhody jednotlivých metód selektívnej excitácie, ako sú DANTE, amplitúdovo modulované tvarované kompozitné impulzy a nami navrhované frekvenčne modulované kompozitné impulzy. Uvažovali sme priemerné vybavenie laboratória NMR

spektroskopie, ktoré nedisponuje syntetizátormi tvarovaných impulzov a ani výstupnými zosilovačmi kategórie A. Nami navrhovaný kompozitný impulz odstraňuje dva hlavné problémy iných metód. To znamená, že sekvencia nevytvára postranné excitované pásma a nevyžaduje opakovanie impulzov rýchlejšie, ako po 100 mikrosekundách. (Rýchlejšie opakovanie impulzov vyžaduje vysokokvalitnú elektroniku impulzného generátora.) Nevýhodou je obsadenie veľkého pametového priestoru akvizičného počítača, kde treba uložiť minimálne 100 premenných typu real a krátky cyklus samotného impulzného programu.

Frekvenčná modulácia kompozitného impulzu je dosiahnutá použitím konštantne dlhých impulzov v celej sekvencii a meniacou sa dĺžkou vývojového času medzi impulzmi. Testované bolo gaussovské rozdelenie vyžiarenej energie v čase a rozdelenie podľa funkcie $\sin(x)/x$.

Radek Meluzín, Tesla Brno, Brno : Ekonomická varianta changeru

Příspěvek se zabývá konstrukcí a využitím jednoduchého changeru pro automatickou výměnu vzorku u nového 200 MHz spektrometru se supravodivým magnetem ze s.p. Tesla Brno. Předvedená koncepce preferuje malé rozměry, hmotnost, nízké energetické nároky a zejména nízkou cenu na úkor možnosti vkládání vzorků v libovolném pořadí, případně dalších možností zahraničních výrobců. Konkrétně tedy tato mechanická konstrukce, prakticky bez elektronického řízení, umožňuje pouze vkládat automaticky do stroje jeden vzorek po druhém v předem daném pořadí a ukládat je po měření zpět do kruhového zásobníku o kapacitě 60-ti vzorků. Toto zjednodušení je vyváženo nesrovnatelně nižší hmotností, rozměry a zejména cenou v porovnání s výrobky předních firem v oboru NMR.

M. Hruškovic, I. Goljer, CL chemické techniky, CHTF SVŠT, Bratislava, J. Dressler, VULM, Modra, J. Betko, Elektrotechnický ústav SAV, Bratislava : Vplyv zmien vonkajšieho magnetického poľa na stabilitu NMR spektrometra so supravodivým magnetom

V práci sme študovali vplyv okolia na stabilitu meraní supravodivého NMR spektrometra VXR 300 z hľadiska jeho možnosti využitia na nepriamu detekciu málo citlivých jadier. Zistili sme, že stabilita magnetického poľa zeme v miestnosti, v ktorej je prístroj umiestnený, má kľúčovú úlohu pri diferenčných meraniach. Fluktuácie poľa sa výrazne prejavujú pri vypnutí lokovacím systéme spektrometra. Lokovací systém kompenzuje vplyv fluktuujúcich magnetických polí pri rutinných meraniach. Experimentálne boli simulované zmeny vonkajšieho rušivého poľa a bol jednoznačne potvrdený ich vplyv. Zistili sme, že tieniace účinky supravodivého magnetu zoslabujú rušiacie magnetické polia cca 30-násobne. Vzhľadom k tomu, že rozhodujúci vplyv na stabilitu supravodivého spektrometra majú meniace sa magnetické polia, doporučujeme výrobcovi spektrometrov špecifikovať magnetické okolie spektrometrov, v ktorom môžu byť inštalované. Tento záver je dôležitý aj pre inštaláciu NMR tomografov.

B. Schneider, J. Straka, J. Spěváček, Ústav makromolekulární chemie ČSAV, Praha :

Použití ^{13}C CP/MAS NMR spekter ke kvantitativní analýze polymerních systémů

Výklad vlivu relaxačních mechanismů na intenzitu ^{13}C NMR pásů při měření CP/MAS NMR spekter. Na příkladu stanovení obsahu zbytkových dvojných vazeb a obsahu fenolových jader v kopolymerech glycidylmetakrylátu s etylendimetakrylátem a v jejich fenolových derivátech byly ukázány možnosti i omezení využití měření ^{13}C CP/MAS NMR spekter při kvantitativní analýze.

Pavel Jurák, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno :
Aproximace spektra NMR metodami regresní analýzy

Příspěvek se zabývá aproximací spektrálních čar Lorentzovou nebo Gaussovou funkcí. Cílem je rychlá regresní analýza, která je charakteristická minimálními časovými nároky při zachování dostatečné přesnosti aproximace.

Se zřetelem na uvedené požadavky byla provedena volba vhodného kritéria a optimalizační metody. Z testovaných metod byly určeny jako nejvhodnější metoda derivační a metoda přímého postupu (relaxační). Derivační metoda vykazuje lepší výsledky při aproximaci silně překrytých spektrálních čar, metoda přímého postupu při aproximaci většího i menšího počtu jen slabě se překrývajících spektrálních čar. Metoda přímého postupu dokáže navíc respektovat rozdílnost vazeb mezi parametry (středem, výškou a pološířkou), což v případě regrese spektra NMR vede k významnému urychlení.

Dalšího urychlení bylo dosaženo rozložením spektra do samostatně řešených bloků a zjednodušením vyčíslení optimalizačního kritéria. Vhodným rozložením do bloků lze aproximaci urychlit až stokrát. Rychlejším vyčíslením kritéria až desetkrát. Velikost urychlení je v tomto případě závislá na počtu a překrytí spektrálních čar.

Výsledky jsou demonstrovány na aproximaci spektra simulovaného, a to bez šumu, obsahujícího šum a tvarově deformovaného. Vzorky spektra obsahují samostatné spektrální čáry i čáry silně se překrývající.

Vladimír Mlynárik, Československý metrologický ústav, Bratislava, Milan Mazúr a Peter Pelikán, Katedra fyzikální chemie CHTF SVŠT, Bratislava : Štúdium hydrolyzy a kondenzácie tetraetoxyasilánu pomocou ^{29}Si NMR

Procesy sol-gel sú novou perspektívnou metódou prípravy anorganických alebo anorganicko-organických polymérnych materiálov s rozličnými vlastnosťami. Možno z nich vytvárať filmy, optické vlákna, nosiče katalyzátorov ap. Na vlastnosti konečného materiálu má rozhodujúci vplyv zloženie východiskovej reakčnej zmesi a podmienky, za ktorých reakcia prebieha. Zdá sa tiež, že počiatočné štádium reakcie rozhodujúcim spôsobom ovplyvňuje výslednú štruktúru materiálu.

Pomocou ^{29}Si NMR sme sledovali hydrolyzu a počiatočné štádium kondenzácie v sústave tetraetoxyasilán + etanol + voda + HCl.

V spektrách je možné rozlíšiť signály atómov kremíka v závislosti od stupňa hydrolyzy, ako aj od ich polohy vo vznikajúcich lineárnych a cyklických oligoméroch. Zo zmeny intenzít signálov môžeme získať informácie o kinetike týchto reakcií.

Dagmar Střešínková, Výskumný ústav pre petrochémiu, Prievidza : Automatizovaná analýza organických zmesí

^{13}C NMR bez predchádzajúcej separácie

Príspevok je prehľadom publikovaných prác v tejto oblasti.

Algoritmus [1, 2] predpokladá vytváranie subspektier z kvantitatívnych ^{13}C NMR spektier tak, aby pomery intenzít signálov patriacich do subspektier boli v pomere malých celých čísel. Každé subspektrum sa postupne podrobí reverznej identifikačnej procedúre na základe vytvorenej banky dát.

Práca [3] využíva na vytvorenie subspektier zistenie konektívití uhlíkov pomocou jednorozmernej verzie v J-ďalekého dosahu rozlíšenej 2D spektroskopie doplnenej 2D heterokorelovanou spektroskopiou.

Autori [4] priradujú signálom analyzovaného spektra čiary referenčných spektier z banky dát bez predchádzajúceho určenia subspektier látok. Kritériom vzájomného priradenia je minimálny rozdiel v chemických posunoch zodpovedajúcich čiar.

Postup [5] simuluje proces vizuálneho prirovnávania spektier a zanedbáva rozdiely chemických posunov vplyvom solvent efektu.

Práca [6] dokumentuje praktickú použiteľnosť automatizovaného postupu kvalitatívnej a kvantitatívnej analýzy ^{13}C NMR v kozmetickom priemysle.

- [1] Laude D.A., Wilkins C.L. : Anal. Chem. 1986, 58, 2820
- [2] Laude D.A., Wilkins C.L. : Anal. Chem. 1987, 59, 576
- [3] Wilkins C.L., Ha S.T.K., Lee R.W.K. : Anal. Chem. 1988, 60, 1055
- [4] Potapov V.V., Vasiliev V.V., Rusinov L.A.: Zavod. Lab. 1987, 53|9|, 23.
- [5] Carpenter S.E., Small G.W.: Anal. Chem. 1988, 60, 1886.
- [6] Mochizuki F., Honda K., Yoneya T.: CA 106 : 182418.

M. Nechvátal, M. Holík, VÚČCH Lachema, Brno :
Využití rutiny pro T_1 měření na přístroji Bruker pro zpracování kinetických dat

Standardním vybavením softwaru FT NMR spektrometrů Bruker je rutina T_1 určená pro vyhodnocování relaxačních časů. Tato rutina umožňuje automatické odečítání intenzit předem zvolených signálů ze série spekter naměřených některou z běžně používaných metod pro stanovení relaxačních časů. Dále lze optimalizovat všechny nebo jen některé hodnoty parametrů funkce :

$$Y = A_3 + A_2 \cdot \exp(-\tau/T_1)$$

(Y - intenzita signálu, τ - prodleva mezi pulzy T_1 měření, T_1 , A_2 , A_3 - optimalizované parametry)

Pokud použijeme jako zpracovávaný soubor série spekter, ve kterých v důsledku chemické reakce dochází ke změnám intenzit signálů výchozích a konečných látek a současně prodlevy τ nahradíme časem t, ve kterém bylo spektrum snímáno, lze použít rutiny T_1 pro sledování rychlosti dané akce. Výpočet rychlostní konstanty se pak pro reakce 1. řádu provádí přímo podle výše uvedené rovnice ($k = 1/T_1$). U reakcí, které se řídí jinou kinetickou rovnicí, se T_1 rutina použije pouze pro odečtení a výpis hodnot Y a t.

K. Beneš, Tesla Brno, Brno : Stanovení relaxačních časů metodou Monte Carlo

Příspěvek se zabývá programem pro výpočet relaxačních časů a rychlostí chemických reakcí 1. řádu metodou generování náhodných vektorů; parametrů teoretické funkce, kterou sleduje systém při vývinu v čase.

Naměřenými daty - tabulkou časů a jim odpovídajícím intenzitám - je prokládána teoretická funkce. Postupným generováním parametrů funkce je minimalisována suma odchylek měřených a vypočtených intenzit. Lze stanovit i případnou přístrojovou chybu; posuv osy času, resp. intenzity.

V závěru je diskutována aplikace a uživatelský interface v NMR spektrometru 80 MHz Tesla BS 587 A, včetně rozboru časové náročnosti.

M. Holík, B. Matějková, J. Haláček, Lachema VÚČCH, Brno : Použití personálního počítače pro výpočet kinetických dat z NMR měření

Použití personálního počítače umožňuje vypočítat parametry kinetické rovnice bez předběžné linearizace. Tím je také možné řešit obecnou kinetickou rovnici 1. řádu, nevratnou i vratnou, s posunutím nulové linie nebo časového počátku bez jakýchkoliv předchozích omezení, např. bez znalosti počáteční koncentrace nebo rovnovážné konstanty.

K výpočtu se používá rekursivní Newton-Raphsonova metoda, podle níž se nová rychlostní konstanta $k_{(n+1)}$ počítá tak dlouho z předcházející hodnoty $k_{(n)}$ dokud se od ní neliší o předem stanovený rozdíl.

$$k_{(n+1)} = k_{(n)} - f(k)/f'(k)$$

Funkce rychlostní konstanty $f(k)$ se vypočítá ze tří normálních rovnic vzniklých derivací účelové funkce U odpovídající obecné rovnici 1. řádu a to podle tří neznámých parametrů a, b, k [1, 2].

$$U = \sum |y - b - a \cdot \exp(-kt)|^2$$

kde y je koncentrace nebo jí odpovídající měřená veličina pro vznikající nebo ubývající reakční komponentu a b je posunutí nulové linie.

Takto vypočítaná hodnota rychlostní konstanty nezávisí na chybě v odečtu amplitudy (konstantní složka v ose y) ani na přesnosti určení počátku reakce (posun v ose x).

- [1] Ž. Jeričević, D.M. Benson, J. Bryan, L.C. Smith, Anal. Chem. 59, 658 (1987)
 [2] H. Gampp, M. Maeder, A.D. Zuberbühler, Anal. Chem. 60, 1083 (1988)

K. Švéda, O. Chramosta, P. Konzbul, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Poznámky k analýze a homogenizaci magnetických polí

V příspěvku se uvádějí některé možnosti, jak usnadnit a zjednodušit experimentální práce, spojené s nastavováním základního pole Z-korekcemi. V návodech je obvykle popsáno vyrovnávání pole Z-korekcemi podle hodnot mag. indukce, naměřených na z-ose magnetu. Tuto práci lze urychlit, proložíme-li uvedenými daty polynomem, ve který přejdeme sférické funkce, popisující v jisté definované oblasti pole jako řešení Laplaceovy diferenciální rovnice; stupeň regresního polynomu se rovná nejvyššímu řádu Z-korekcí. Pro kompenzaci nehomogenity je nutné znát citlivosti korekcí, tj. poměr jejich polí a vytvářejících proudů.

Obdobně lze stanovit proudy v korekčních vinutích, odpovídajících sektorovým a tesseractálním složkám sférických funkcí, omezíme-li se na rozklad pole do 2. řádu, jak to odpovídá nejběžnějšímu počtu neaxiálních korekcí. Pro složky X, Y, $X^2 - Y^2$ a XY se měří v bodech na kružnici v rovině $z = 0$; pro XZ a YZ se stanoví rozdíl hodnot, naměřených v sobě odpovídajících bodech na kružnicích v rovinách $z = k$ a $z = -k$. Hledané regresní koeficienty jsou součinitelé u goniometrických funkcí cos a sin s jednoduchým a dvojnásobným argumentem.

Analýza pole lze stanovit regresní koeficienty i vyšších řádů, to však vyžaduje větší počet vhodně rozložených měřících bodů (platnost použití sférických funkcí, Shannonův teorém).

V příspěvku byly uvedeny mapy polí dvou supravodivých magnetů, navržených a realizovaných v nízkoteplotní laboratoři ÚPT ČSAV (Ing. Jelínek, CSc et al), před a po homogenizaci, simulované na počítači.

Získané zkušenosti dovolují relativně jednoduché a rychlé nastavení magnetu ve zvoleném prostoru. Jemné vyladění pole však spočívá i nadále na požadavcích, zkušenostech a trpělivosti operátora.

Alena Horská, Milan Hájek, Robert Piffl, Institut klinické a experimentální medicíny, Praha : Využití tabulkových programů v NMR laboratoři

Ačkoliv pro databázové úlohy či zpracování textu je již samozřejmě spolehnout se na některý z komerčních programů, při provádění laboratorních výpočtů na osobních počítačích se stále ještě dává přednost klasickým programovacím jazykům. Avšak i v této oblasti nabízejí komerční programy takové možnosti, že v mnoha laboratořích zdomácněly tabulkové programy, původně vyvinuté pro finanční analýzy. Jejich nejpobulárnějším reprezen-

tantem je Lotus 1-2-3, který poskytuje rovněž grafické funkce a je vybaven programovacím makrojazykem.

Na pracovišti MR IKEM byly pro Lotus 1-2-3 připraveny tabulky včetně makroinstrukcí pro rutinní zpracování a grafickou prezentaci výsledků ^{31}P NMR spektroskopie. Lotus 1-2-3 verze 2 vzhledem k síle programovacího jazyka, standardními funkcím a operacím umožňuje i řešení složitějších úloh jako je víceparametrová lineární regrese, optimalizace, statistická analýza.

Nevýhodou verze 2 Lotusu 1-2-3 je, že tisk grafů a překlad datových souborů vytvořených jinými programy je nutné provádět mimo vlastní tabulkový program a není proto možné tyto operace automatizovat makroinstrukcí. Dokonalejší verze 3 není doposud v ČSSR rozšířena a prakticky ji nelze použít na počítačích s operační pamětí 640 kB a méně.

Zmíněné nedostatky neplatí o tabulkovém programu Quattro firmy Borland. Protože umožňuje používat příkazy totožné s příkazy Lotusu 1-2-3, je možné převedení tabulek a makroinstrukcí vytvořených v Lotusu 1-2-3, jak bylo na pracovišti MR v IKEM prakticky ověřeno. V rozporu s tvrzením firmy Borland v některých případech jsou v Quattro příkazy realizovány poněkud odlišně než v Lotusu 1-2-3, rozdílů jsou však nepodstatné.

V kombinaci s dBase 3+ resp. dBase 4 umožňuje tabulkový program Quattro vytvořit ucelený systém pro archivaci, zpracování a prezentaci experimentálních dat v NMR laboratoři.

P. Baričič, Výskumný ústav liečiv, Modra : Databázove spracovanie ^{13}C -NMR spektier na personálnom počítači

Vo VULM bol vyvinutý programový systém na spracovanie ^{13}C -NMR spektier, implementovateľný na personálne počítače kompatibilné s IBM-PC-AT. Systém sa skladá z dvoch hlavných častí :

- 1) podsystém na generovanie databázy ^{13}C -NMR spektier
- 2) podsystém využívajúci databázu pri interpretácii neznámych spektier

Molekulové štruktúry sú v databáze reprezentované topologickou tabuľkou, ktorá je pretransformovaná do kanonického kódu. Vygenerované kanonické kódy sú organizované do binárnych stromov.

Položky databázy sú totožné s položkami Bremserovho katalógu známych spektier. Okrem spektrálnych dát sú v databáze uchovávané aj obrazovkové souradnice atómov molekúl, čo je výhodné pri rýchlom vykreslení nájdených štruktúr.

Interpretačná časť systému umožňuje vyhľadávať spektrá podľa užívateľom definovaných subštruktúr a chemických posunov. Vyhľadávanie podľa subštruktúr je voliteľné.

Maximálna veľkosť generovanej databázy je obmedzená veľkosťou pevného disku a veľkosťou spracovávaných molekúl. Na 40MB disk je možné týmto systémom uložiť cca 60000 ^{13}C -atómových molekúl. Systém je určený predovšetkým na tvorbu lokálnych databáz využiteľných v bežnej laboratórnej praxi.

D. Šaman, M. Buděšínský, Ústav organické chemie a biochemie ČSAV, Praha : Baze C-13 NMR dat pro vybrané typy látek

Rostoucí množství měřených C-13 NMR spekter si vynucuje jejich precizní inventarizaci. Základními důvody pro vznik databáse C-13 NMR dat jsou možnost snazší interpretace spekter neznámých látek a snaha zabránit možné duplicitě v měření. Database mohou být orientovány obecně nebo se může jednat o soubory spekter látek určitého strukturního typu. Účelné využití obecných databáse je však limitováno jednak na soubory s velkým počtem záznamů a jednak vysokými finančními náklady (alespoň v případě komerčních produktů) na jejich zavedení v ČSSR. Naproti tomu systémy "šité na míru" orientaci pracoviště lze realizovat v poměrně krátké době a s relativně omezeným počtem pracovníků.

Auřory popisovaná databanka DAMILA vznikla v r. 1985 a soustřeďuje v sobě všechna až dosud literárně popsaná, ev. na ÚOCHB ČSAV změřená C-13 NMR spektra eskviterpenických laktonů (cca 1500 sloučenin). Jednotlivé záznamy mají proměnnou délku a neobsahují grafickou informaci o struktuře. Součástí systému je i balík programů, který umožňuje :

- 1) hledání spekter látek podle různých strukturních rysů
- 2) hledání spekter látek na základě chemických posunů
- 3) automatickou identifikaci typů acylových skupin

Kamil Nejezchleb, Tesla Brno, Brno : Automatické testování základních parametrů NMR spektrometru

Příspěvek se zabývá programem pro výpočet základních parametrů NMR spektrometru. Cílem programu je umožnit vyhodnocování testů bez zásahu operátora a tím zamezit možnému ovlivnění výsledku. V současném stavu umožňuje program zpracovávat testy citlivosti, rozlišení, tvaru čáry a zrcadlových signálů.

Nejprve je ve spektru vyhledána oblast šumu, stanovena její střední hodnota a střední kvadratická odchylka. V tomto místě programu lze také zpřesnit základní čáru spektra lineární nebo kvadratickou aproximací metodou nejmenších čtverců.

V další části se program větví na jednotlivé testy. Výsledky testů lze zobrazit na grafickém monitoru, zapisovači nebo vypsát na tiskárně. V případě nedosažení parametrů ve stanovených mezích pro daný typ spektrometru (BS 587A) je u všech typů výstupu na tento fakt výrazně upozorněno.

Program je možno spustit přímo z NMR programu, což spolu s interpretací povelů NMR programu dovoluje vytvořit kompaktní sled činností spektrometru od počátku měření až po výsledek testu.

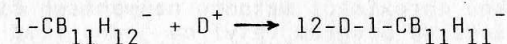
Petr Sedmera, Mikrobiologický ústav ČSAV, Praha : Automatický měnič vzorků ASM-100 firmy Varian

Jako přídatné zařízení ke spektrometrum Gemini, VXR a Unity se dodává počítačem řízený robot s pneumatickým ovládáním a zásobníkem pro 50 nebo 100 kyvet. Rozšiřuje možnosti těchto automatizovaných systémů o výměnu vzorků. Ta je možná buď v multiexperimentovém provozu (9 vzorků) nebo v automatickém režimu (50 či 100). Při něm se předem volí délka běhu a maximální čas rezervovaný pro jeden experiment. Inicializace pokusu se provádí buď speciálním programem (zadáva se jméno MAKRO příkazu), nebo stejně jako v normálním provozu. Během měření lze získat informaci o stavu experimentů, prohlížet hotová spektra, přidá-

vat další vzorky, případně zařadit prioritní měření. Pod kontrolou počítače jsou stabilizace pole, zesílení, ladění, trvání sběru dat atd. Součástí základního vybavení jsou MAKRA pro měření ^1H , ^{13}C , HC, HCAPT, CAPT a HCOSEY. Tvorbou dalších příkazů pro měření i zpracování dat není ničím omezena. K plnému využití zařízení je třeba plotter s automatickým posunem papíru a magnetopásková jednotka či přípojka k počítačové síti. ASM-100 umožňuje lepší využití magnetu a snížení počtu obsluhy. Nejvhodnější je pro rutinní a seriová měření. Nevýhodou je striktní oddělení multiexperimentového a automatického provozu, nemožnost doladění sondy a v neposlední řadě i relativně vysoká cena.

Stanislav Heřmánek, Drahomír Hnyk, Ústav anorganické chemie ČSAV, Rež : Antipodální efekt u borových skeletů - kvantově chemické objasnění protichůdných informací plynoucích z $\delta(^{11}\text{B})$ a chemického chování

Kvantově chemické výpočty (EHT, CNDO/2, AM1) na perturbovaných uzavřených polyedrech, tj. na ikosaedru $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ a deseti-
vrcholovém polyedru $\text{B}_{10}\text{H}_{10}^{2-}$ prokázaly, že náhrada BH vrcholu heteroatomem nebo náhrada vodíkového atomu +M substituentem se projevuje změnou elektronové hustoty v jednotlivých orbitalech na protilehlém "antipodálním" atomu. Náhrada BH vrcholu kladně nabitým heteroatomem ($\text{S} > \text{NH} > \text{CH} > \text{BH}$) vyvolává snížení e.h. ve dvou p-orbitalech uložených tangenciálně vůči povrchu polyedru (" π " elektrony) na antipodálním atomu. Část vazebných elektronů A-atomu se přitom přenáší do radiálně uloženého σ orbitalu téhož atomu. Snížení e.h. v " π " orbitalech je v soulase s výrazným posunem NMR signálu tohoto skeletálního atomu do nízkého mag. pole a zvýšení e.h. v B-H vazbě je zase v soulase s námi zjištěným přednostním atakem elektrofilních částic radiálně orientované B-H vazby :



Naproti tomu bylo nalezeno, že vlivem silných +M substituentů O^- a F dochází ke zvýšení " π " elektronové hustoty na A-atomu, a to na úkor e.h. v radiálně umístěném σ orbitalu, směřujícího k atomu vodíku (B-H vazba). To je v soulase s posunem NMR signálu A-atomu k vyššímu mag. poli a se snížením reaktivity B-H radiální vazby vůči elektrofilním částicím. V důsledku toho dochází vlivem přítomného +M substituentu k přednostní substituci v m- poloze.

Z uvedeného vyplývá, že e.h. v " π " orbitalech ovlivňuje chemický posun daného jádra, a e.h. v σ orbitalech je mírou reaktivity jednotlivých B-H vrcholů v borovém klastru.

Josef Jirman, Antonín Lyčka, Výzkumný ústav organických syntéz s.p., Pardubice : ^{13}C a ^{33}S NMR spektra sulfonovaných naftalenů a naftolů

Sulfonace v naftalenové řadě je velmi důležitou operací pro přípravu meziproduktů v barvářském průmyslu. Sulfonace v aromatické řadě je ovšem reakce neselektivní a vratná a je prakticky nemožné ji vést zcela bezodpadově, což je velkým ekologickým problémem. Pro další využití odpadů je třeba disponovat vhodnou analytickou metodou k charakterizaci látek. K tomuto účelu může být využita ^{13}C NMR spektroskopie. Byla měřena ^{13}C NMR spektra všech přímou sulfonací dostupných derivátů 1- a 2-naftolu. Výsledky byly vypracovány formou ^{13}C SCS sulfoskupin v řadě 1-naftolu a 2-naftolu.

Dále byla měřena ^{33}S NMR spektra roztoků 11 naftalensulfonů, 11 naftolsulfonů, dvou sulfonových naftalendiolů a jejich aniontů. ^{33}S NMR chemické posuny lze v některých případech použít k charakterizaci látky vzhledem k rozdílům v chemických posunech sulfoskupiny v poloze α a β naftalenového jádra. Pološířky signálů se pohybují od desítek do stovek Hz. Tvorbou aniontu OH skupiny sulfonovaného naftolu neovlivní výrazněji ani chemický posun, ani pološířku ^{33}S NMR signálů sulfoskupin.

Antonín Lyčka, Josef Jirman, Aleš Cee, Výzkumný ústav organických syntéz s.p., Pardubice : ^{15}N , ^{13}C a ^1H NMR spektra některých kovokomplexních azobarviv

Byla měřena ^{15}N , ^{13}C a ^1H NMR spektra 2:1 kovokomplexních azobarviv vzniklých reakcí kobaltnatých solí s produkty kopulace substituovaných 2-hydroxyanilinů s acetoacetanilidem za přítomnosti kyslíku. Na rozdíl od prekursorů, existujících výhradně v hydrazonových formách, výsledné kobaltité komplexy existují jako E- azosloučeniny. Kobalt je vázán kyslíku, které pocházejí z hydroxy- a amidické skupiny, a dusíkem z výchozího substituovaného anilinu.

J. Zajíček, Ústav organické chemie a biochemie ČSAV, T. Vaněk, T. Vaisar, I. Vacek, E. Smolková, Přírodovědecká fakulta UK, Praha : Využití NMR při přípravě stacionárních chromatografických fází

Byla připravena nová stacionární fáze pro vysokoúčinnou kapalinovou chromatografii s β -cyklodextrinem navázaným na silikagel. Měření ^{13}C a ^{29}Si CP MAS NMR spekter byla prokázána existence kovalentní vazby mezi cyklodextrinem a silikagelem bez spojovacího řetězce. Pomocí ^{13}C CP MAS NMR byla také studována hydrolytická stabilita nové fáze.

Pavol Novomeský, Katedra analytickej chémie FaFUK, Bratislava : Stereochemia komplexov Co(III) s aminopolykarboxylovými kyselinami

Štruktúra diamagnetických komplexov kyseliny mezo-1,2-difenyletyléndiamíntetraoctovej (mezi-DPHEDTA) a kyseliny rac-1-fenyletyléndiamíntetraoctovej (PHEDTA) s kobaltom (III) v roztokoch D₂O bola určená z ¹H a ¹³C NMR spektier. Spôsob koordinácie oboch ligandov je rovnaký, v oktaédrických komplexoch sa vytvárajú štyri glycinátové kruhy a jeden etyléndiamínový kruh. Hlavným faktorom, určujúcim stereochemiu a stabilitu týchto komplexov, je konformácia etyléndiamínového kruhu. V komplexe [Co(PHEDTA)]⁻ má tento kruh λ-gauche konformáciu s fenylovou skupinou v ekvatoriálnej polohe (³J_{HH,trans} = 13,8 Hz, ³J_{HH,gauche} = 3,2 Hz). V komplexe [Co(mezo-DPHEDTA)]⁻ hodnota ³J_{HH} = 7,6 Hz ukazuje, že dihedrálny uhol metínových protónov je podstatne menší ako 60° a etyléndiamínový kruh má menej stabilnú obáľkovú konformáciu.

L. Zalibera, I. Goljer, CHTF SVŠT, Bratislava, V. Fábryová, NsP Bezručova, Bratislava : Sledovanie metabolizmu defektných erytrocytov pomocou ³¹P NMR spektroskopie

Pomocou ³¹P NMR spektroskopie sa sledoval metabolizmus vitálnych erytrocytov in vitro klinicky zdravých donorov (n=11) a pacientov trpiacich sférocytózou (n=6), deficitom glukózo-6-fosfát dehydrogenázy (G6PD, n=6) a pyruvát kinázy (PK, n=6). Zistilo sa, že u ľudí trpiacich sférocytózou nastáva pomalšie odbúravanie 2,3-difosfoglycerátu (2,3-DPG) a narastanie anorganického fosfátu ako u zdravých. V erytrocytoch s deficitom G6PD rozklad 2,3-DPG je pomalší oproti zdravým. V prípade deficitu PK rozklad 2,3-DPG je minimálny a pravdepodobne nastáva úplná inhibícia difosfoglycerofosfatázy. ³¹P NMR spektroskopie umožňuje sledovať metabolické zmeny u zdravých a chorých ľudí.

Jan Němeček, Mikrobiologický ústav ČSAV, Praha : Identifikace a stanovení látek v moči pomocí FT NMR

Moč je tělní tekutina obsahující nízkomolekulární látky. Jejich koncentrace poskytují obraz o stavu organismu. Výsledky analýz moči mají význam zvláště při studiu metabolických poruch, reakcí organismu na vnější podněty, vylučování cizorodých látek atd.

NMR spektroskopie se ukázala být vhodným doplňkem ke standardním analytickým metodám používaným v této oblasti (HPLC, GC-MS). Ve srovnání s nimi má sice nižší citlivost, ale její výhodou je možnost pracovat s neupraveným vzorkem. Navíc detekuje všechny vodík obsahující metabolity, čímž poskytuje komplexnější pohled na řešenou problematiku.

Úkoly kladené na NMR spektroskopii jsou následující :

- potvrdit/vyloučit přítomnost látky ve vzorku
- stanovit látku
- určit strukturu/substrukturu neidentifikované látky.

Identifikace látek je založena na experimentálním zjištění chemických posunů, multiplicit a konektivit signálů, a na porovnání těchto údajů se spektry standardů (v současnosti knihovna obsahuje cca 100 látek). Při stanovení je koncentrace metabolitů vztahována na koncentraci kreatininu jako přirozeného vnitřního standardu.

Řešení je ztíženo nízkou koncentrací látek (řádově 10⁻⁴ mol/l a vyšších) ve vodě (koncentrace protonů cca 110 mol/l). Přesto je vyhovující metodou potlačování signálu vody presaturace. Metody založené na spinovém echu totiž významně deformují intenzity a fáze signálů, spektra jsou pak špatně interpretovatelná.

V moči se vyskytují řady strukturně podobných látek ve srovnatelných koncentracích. Vzhledem k překryvům signálů je identifikace sloučenin z 1D spekter možná jen výjimečně. Pro spolehlivé určení metabolitů je třeba vycházet z 2D spekter (¹H-J-rozlišená spektra, H-H COSY, H-H RELAY). Někdy jsou koncentrace látek v moči postačující k provedení 1D ¹³C a H-C COSY experimentu.

Další komplikací je závislost chemických posunů na pH. To lze určit na základě rozdílu chemických posunů signálu kreatininu, případně je třeba ho upravit.

Celkem bylo analyzováno 15 vzorků. U většiny byla měřena 1D i 2D spektra. Získané výsledky se ukázaly být velmi užitečnými pro potřeby klinických biochemiků.

SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

OS elektronové a iontové spektroskopie

uspořádala 25.4.1989 ve spolupráci s katedrou elektroniky a vakuové fyziky MFF UK přednášku prezidenta Mnichovské university prof. Dr. Wulfa Steinmanna "Spectroscopy of Surface States by Two-Photon-Photoemission".

Vzhledem k tomu, že redakce neobdržela další podrobnosti o akci, odkazujeme čtenáře na organizátory z odborné skupiny Doc. Dr. L. Eckertovou, CSc a Dr. J. Zemka, CSc.

Ve dnech 9. - 13.10.1989 uspořádala OS ve spolupráci s Fyzikálním ústavem ČSAV Podzimní školu elektronové spektroskopie ve Strážnici, již se zúčastnilo 68 frekventantů.

Program školy zahrnoval tři okruhy problémů : teoretické základy, fotoelektronovou spektroskopii a Augerovu elektronovou spektroskopii. Dále byly do přednášek zahrnuty příbuzné obory jako například technika ultravysokého vakua, důsledky odprašování urychlenými ionty, atomová struktura povrchů a v současné době moderní metoda elektronové tunelovací mikroskopie. Program byl sestaven tak, aby účastníci školy měli dostatek času na dotazy a diskusi otevřených problémů. Diskuse byla živá a umocnila působení školy na posluchače. Značná pozornost v přednáškách i diskusích byla věnována analytickým aplikacím spektroskopických metod.

Podzimní škola elektronové spektroskopie byla koncipována tak, aby oslovovala především mladé, začínající odborníky ve spektroskopii a usnadnila jim tak orientaci v oboru, dále pak čerstvé absolventy vysokých škol, kteří sice v oboru elektronové spektroskopie přímo nepracují, ale jistě se setkají s potřebou využít analytických možností těchto technik.

Podzimní školu elektronové spektroskopie připravil vedoucí odborné skupiny Dr. J. Zemek, CSc.

KOMISE

Komise pro standardy a referenční materiály

uspořádala ve spolupráci s ÚAS Řízení a kontroly jakosti SPCH ČSVTS ve dnech 18. - 22.9.1989 v Bečově nad Teplou seminář Referenční materiály a jakost analytických výsledků, jehož se zúčastnilo 41 odborníků. Seminář připravil předseda komise RM Ing. Ivan Obrusník, CSc.

21 přednesených příspěvků a 2 panelové diskuse ukázaly aktuálnost referenčních materiálů (RM) ve spektrometrii a v analytice vůbec. Organizace semináře dávala dost prostoru jak přednášejícím, tak i diskutujícím. Právě tyto diskuse, jakožto i dvě diskuse panelové, přinesly účastníkům semináře řadu užitečných informací, které lze jinou cestou získat jen velmi obtížně. Diskuse pomohly při získání informací o RM vyráběných u nás i jinde a o možnosti jejich získávání. Relativně dostupné jsou RM z oblasti geologie a v některých aplikacích hutní analytiky. Postupně se zlepšuje (ale pomalu) zásobení RM pro oblast sledování znečišťování životního prostředí. Prakticky jsou dnes u nás k dispozici 3 RM pro analýzu biologických materiálů - řasy a vojtěška (ÚRVJT Košice) a hovězí játra (ČSMÚ a VŠZ).

Odborná úroveň přednesených příspěvků byla velmi dobrá a účastníci projevíli zájem o to, aby bylo plně znění vybraných referátů a abstrakt ostatních příspěvků otištěno ve zvláštním čísle Bulletinu nebo alespoň pohromadě v běžném čísle. RM mají v současné době velkou úlohu při zabezpečení jakosti (kvality) analytických dat. Proto je třeba, aby byly RM s různými úrovněmi atestace používány v každodenní analytické praxi. Na semináři byli postrádáni zástupci z oblasti spektrometrie organických látek. Právě v této oblasti začíná být použití RM velmi aktuální, a proto je třeba, aby se příslušné odborné skupiny ČSSS otázkou RM zabývaly a aby alespoň jeden odborník na tyto metody aktivně pracoval v Komisi pro RM.

Ze závěrečné diskuse na semináři vyplynulo, že výrobci RM u nás mají velké potíže s finančním zabezpečením RM (zvláště ve fázi přípravy materiálu před atestací). Bylo by třeba, aby se příprava a atestace RM dostaly do plánů RVT příslušných resortů. Účastníci doporučili, aby pořadatelé semináře, tj. Čs. spektroskopická společnost a ČSVTS, oficiálně upozornili na

současný stav RM u nás a na cesty pro jeho zlepšení instituce jako ÚNM, ČSMÚ a SKVTIR. Organizace semináře proběhla hladce, středisko Komtesa v Bečově vytvořilo pro průběh semináře velmi dobré podmínky. Další seminář tohoto typu by měl být za dva až tři roky.

Komise přístrojová

Ve dnech 17. a 18. října 1989 se na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze uskutečnil seminář věnovaný novému plamenovému emisnímu fotometru "FLAPHOvar". Seminář uspořádala firma C. Zeiss, Jena ve spolupráci s Čs. spektroskopickou společností a zúčastnilo se ho přes 50 pracovníků z celé republiky. Přístroj sám absolvoval podobné předvedení v Maďarsku, Rumunsku a Bulharsku a tak měl při své premiéře v Praze za sebou cestu přes 3500 km osobním autem. Fungoval bezvadně (jedna skupina účastníků však zažila určité potíže, které byly způsobeny nedostatečným proplachováním přístroje - jak se ukázalo, jednalo se o stejnou závalu, jakou byl v TV seriálu "Návštěvníci" postižen CML - přístroj stál nakřivo).

Jedná se o čtyřkanálový plamenový emisní fotometr vybavený filtry, jeden kanál je volitelný jako "vnitřní standard". Pracuje s acetylenovým nebo propanovým plamenem a stanovovat lze Na, K, Ca, Li (standardní vybavení), Mg, Cs, Rb, Ba a Sr. Všechny jeho funkce jsou řízeny mikroprocesorem, připojitelná je tiskárna, zařízení pro zápis a čtení magnetických štítků, zapisovač (pro každý kanál), vzorkovač nebo počítač. Přístroj bude na trhu v roce 1990 a pokud se někteří zájemci nemohli semináře účastnit, máme pro ně v omezeném počtu firemní prospekt.

Ing. Karel Volka, CSc

Informace

Jednodenní seminář "Akreditace laboratoří - problémy a perspektivy" bude uspořádán koncem dubna 1990 na VŠCHT Praha. O dalších podrobnostech budou zájemci včas informováni.

Adresa: Sdružení "Analytika", katedra analytické chemie,
VŠCHT, Suchbátarova 5, 166 28 Praha 6
Ing. Miloslav Suchánek, CSc

REFERÁTY

XIXth European Congress on Molecular Spectroscopy

M. Závětová, K. Volka

XIX. Evropský kongres molekulární spektroskopie (EUCMOS) se konal ve dnech 4. až 8. září 1989 v areálu Technické univerzity v Drážďanech. Kongresy EUCMOS se pořádají každé dva roky a o místě jejich konání rozhoduje mezinárodní komitét, vedený Prof. W. J. Orville-Thomaseem z University v Salfordu. Organizace XIX. kongresu byla svěřena zkušenému kolektivu spektroskopiků vedenému Prof. W. E. Stegerem, který se svého úkolu zhostil výborně a vedle bohatého programu vědeckého připravil i nezvykle bohatý program společenský.

Mezi 500 účastníky z Evropy, ale i z Indie, Kanady, Kuby, Japonska, Jihoafrické republiky a USA, bylo i 14 odborníků z Československa, což vzhledem k místu konání není mnoho.

Ozdobou kongresu byla aktivní účast nositele Nobelovy ceny Prof. G. Herzberga z Kanady, bez přehánění živé legendy molekulární spektroskopie. Jeho přednáška o historii objevu a interpretace spekter dvou významných radikálů (CH_2 a H_3) také kongres zahájila.

V další plenární přednášce informoval B. Wilhelmi (NDR) o moderních femtosekundových technikách, umožňujících sledovat rychlé molekulární procesy. N. I. Koroteev (SSSR) přednášel o koherentní Ramanově spektroskopii excitovaných elektronových stavů velkých molekul s pikosekundovým časovým rozlišením. H. H. Mantsch (Kanada) referoval o aplikacích IČ spektroskopie v biologii a medicíně, A. Novak (Francie) o užití vibrační spektroskopie při studiu strukturních fázových přechodů v částečně uspořádaných pevných látkách a Z. R. Grabowski (Polsko) o elektro-novém přenosu excitovaných stavů a o radiačním elektronovém přenosu. O experimentálních technikách a výsledcích získaných pomocí multifotonové ionizační hmotové spektrometrie přednášel J. Grottemeyer (BRD). Prof. Winnewisser nadchl přítomné nejen pohledy spektroskopika do nitra naší Galaxie, ale i úchvatnými snímky Alp, kam umístil svůj teleskop. Prof. Zerbi referoval o polykonjugovaných vodivých polymerech; velmi zajímavé bylo v této souvislosti srovnání pojmů zavedených fyziky a chemiky pro popis týchž jevů.

Atraktivní téma - ABC dnešní analytické chemie : využití počítačů - zpracované s profesionální zkušeností a přednesené s šarmem a zaujetím Dr.J.G.Grasseli, bylo vynikající tečkou za konferencí.

Vedle plenárních přednášek, které až na výjimky měly vysokou úroveň, probíhala jednání konference ve čtyřech sekcích. Zde odeznělo 34 zvaných referátů a na 90 krátkých původních příspěvků. Mnohé z posledně jmenovaných by se byly lépe uplatnily ve vývěskové sekci, ať již pro formální závady (jazykovou bariéru, nečitelnost diapositivů), nebo pro obsah (např. monotónní předčítání obsáhlých tabulek s číselnými údaji). Je škoda, že z 34 zvaných referátů ani jeden nepřednesl Čechoslovák (pro srovnání: NDR - 8, NSR - 8, SSSR - 3, Francie 2, Švýcarsko, Belgie, Dánsko, Holandsko, GB, Bulharsko, Polsko po 1 a hosté z Kanady, Japonska a USA celkem 6). Tematicky byly příspěvky orální i vývěskové zařazeny do jedenácti okruhů : strukturní problémy, molekulární konstanty, krystaly a pevné látky, povrchy, anorganické sloučeniny, elektronové stavy, dynamika molekul, molekuly významné v biologii, polymery, komplexy, experimentální techniky a analytické aplikace. Většina příspěvků využívala metod IČ a Ramanovy spektroskopie, ostatní spektroskopické obory (hmotnostní, povrchová a luminiscenční spektroskopie a metody EPR, NMR) byly zastoupeny podstatně méně. Příspěvky ve vývěskové sekci byly vystaveny vždy 2 dny a na závěr jejich autoři odpovídali na dotazy. Živé diskuse, z nichž nejvíce profituje obvykle autor práce, potvrdily vhodnost prezentace původních výsledků právě formou vývěsek. Za léta došlo ke značnému pokroku jak po stránce formální tak obsahové : většina vývěsek dovedla nejen na první pohled upoutat, ale i v kondenzované formě sdělit hlavní myšlenky práce. Vyděšené kopie textů pro publikaci byly skutečně výjimkou.

Organizátoři připravili pro účastníky technicky vynikající obsáhlý sborník abstrakt (350 stran, jmenný rejstřík). Texty větší části příspěvků mají vyjít v časopise Journal of Molecular Structure. Výstava spektrálních přístrojů a odborné literatury vhodně doplnila vědecký program konference. Domácí firma Zeiss předvedla mj. nový mřížkový IR spektrofotometr Specord M82, jehož předností by měl být nový detektor, lepší sušička proplachovacího vzduchu a především oddělení počítače (komerční Robotron) od vlastního spektrofotometru. Ostatní firmy přivezly levnější verze FT IR spektrometrů (Bruker 2, Perkin-Elmer, Bomem po jednom). Velký zájem byl o příslušenství : mikroskop a zařízení pro snímání Ramanových spekter (Bruker).

Příští, jubilejní XX.EUCMOS má být v roce 1991 v Záhřebu (Jugoslavie).

Prof.Ing. Eduardu Plškovi, DrSc k šedesátinám

Uznávaný representant československé spektroskopie, vynikající pedagog a dlouholetý funkcionář Čs.spektroskopické společnosti prof.Ing.Eduard Plško, DrSc oslaví 11.3.1990 své šedesátiny. Mnozí jeho žáci a především posluchači jeho přednášek na seminářích a konferencích asi o tom zapochybují, ale je to ověřeno.

Popis, rozbor a hodnocení dosavadní vědecké činnosti a pedagogické aktivity svěžího jubilanta by mohly již dnes posloužit jako disertační téma, neboť úctyhodný počet téměř 170 publikací od r. 1954 v mnohém dokumentuje vývoj čs.atomové spektroskopie v posledních desetiletích. Jenže takové akademické hodnocení by bylo nejen unáhlené, ale též neúplné. Nepostihovalo by asi to, co všechno prof.Plškovi získává jeho autoritu, ale i přátelství spektroskopiků v Československu i v zahraničí: polyhistorický rozhled, uvážlivé a jasné formulace, toleranci v diskusi, povzbudivé uznání práce druhých, plný respekt etiky vědecké práce, skromnost v kolektivní spolupráci, fundovaný odhad možného vývoje a hlavně mladistvý zápal, s nímž dodává tvůrčí elán i mnohem mladším kolegům. A to ještě nebyla připomenuta témata, k nimž svým osobitým a okouzlujícím způsobem diskutuje ve společnosti přátel, hudbou a výtvarným uměním počínaje a usměvnými filosofickými glosami konče.

Redakce Bulletinu se proto rozhodla představit dosavadní aktivitu prof.Plška formou několika příspěvků jeho spolupracovníků, přátel a žáků. Připojuje k tomu upřímné přání pevného zdraví a mnoha dalších úspěchů ve vědecké práci i v osobním životě.

Za redakci Bulletinu
Milan Fara

Vladimír Streško, Geologický ústav UK, Bratislava :
Prof. Ing. Eduard Plško, DrSc - 60 ročný

Životopis

Prof. Ing. Eduard Plško, DrSc sa narodil 11.3.1930 na Cerovej na Záhorí v učiteľskej rodine. Po maturite na Gymnáziu v Trnave študoval na Chemicko-technologickú fakultu SVŠT v Bratislave, ktorú ukončil r. 1953 a ihneď nastúpil na umiestenku do n.p. Kovohty Istebné, odkiaľ prešiel na internú vedeckú aspirantúru na SAV v Bratislave. Kandidátsku dizertačnú prácu obhájil r. 1957 na tému: "Sledovanie chrómanov, molybdénanov a volfrámanov v roztokoch elektrolytov optickými metódami". Pracoval ako vedecký pracovník, od roku 1961 ako samostatný vedecký pracovník a po obhájení doktorskej dizertačnej práce v obore analytická chémia na tému "Podmienky zlepšenia základných parametrov spektrochemickej analýzy" od r. 1968 ako vedúci vedecký pracovník na Ústave anorganickej chémie SAV v Bratislave, kde vybudoval a viedol spektrochemické laboratórium. Vzhľadom na svoj záujem o pedagogickú prácu sa habilitoval a r. 1968 bol menovaný docentom pre odbor analytická chémia. V r. 1970 prešiel do školských služieb ako vedúci Oddelenia analytickej chémie Geologického ústavu Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského a v r. 1977 bol menovaný riadnym profesorom pre odbor analytická chémia, kde pracuje doteraz.

Vedecká práca

Už počas vysokoškolského štúdia sa začal zaujímať o optiku a jej využitie pri sledovaní vzťahov medzi vlastnosťami a zložením látok, ktorej problematike ostal verný počas celej svojej dlhoročnej bohatej vedeckej činnosti, v ktorej ju rozvinul v horizontálne i vertikálne širokej miere.

O šírke jeho záberu v sfére optických metód svedčia jeho práce z oblasti interferometrickej refraktometrie, polarimetrie, Faradayovho javu, fluorescenčnej spektroskopie, reflexnej spektroskopie, spektrofotometrie, merania farebnosti, atómovej absorpčnej spektrometrie a najmä atómovej optickej emisnej spektroskopie, na ktorú sa postupne zamerl a špecializoval. Pritom je potrebné zdôrazniť tú okolnosť, že jeho práce sú zamerané nie len na analytickú aplikáciu, ale aj na riešenie s ňou spojených problémov obecného i prístrojového charakteru.

V súvislosti s tým spomeniem aspoň niektoré zo zásadných metodických príspevkov Prof. Plška k rozvoju optickej atómovej spektroskopie :

Jeho štúdium kontinuálnych spôsobov vnášania práškových vzoriek do oblúkového výboja viedlo k osvetleniu mechanizmu funkcie presypových elektród vysvetlenému pôsobením akustických nárazových vln. Podrobné zhodnotenie použitia rozptylových diagramov a zavedenie ich diferencnej prezentácie viedlo ku kritickej analýze charakterizujúcej ohraničenie možností ich využitia. Návrh a zavedenie vzťahových a neskoršie normovaných vzťahových kriviek kvantifikujúcich opis vyparovania zložiek do výbojového priestoru. Tieto výsledky slúžili ako podklad ďalšieho rozvoja v zahraničí. V oblasti fotografickej fotometrie nadobudli jeho výsledky týkajúce sa hodnotenia spoľahlivosti a optimalizácie rôznych postupov transformácie sčernania medzinárodné tvornie. Osobitnú bohatú oblasť výskumnej činnosti Prof. Plška tvoria jeho práce venované chemometrii spektrochemickej analýzy, kde treba uviesť najmä optimalizáciu ním navrhnutých nelineárnych spô-

sobov adičnej techniky, vysvetlenie logaritmicky normálneho rozloženia spektrochemických výsledkov, vznik a opis nesúmerného rozloženia s modusom vyšším než aritmetický stred niektorých meraných veličín, nový opis rozloženia obsahov zložiek v geologických materiáloch vyhovujúci stopovým, stredným i vysokým obsahom, spôsob zistenia priemernej hodnoty a rozptylu v prípade súborov, kde časť výsledkov je pod medzou stanovenia, zhodnotenie vplyvu chyby analýzy na rozloženie obsahov zložiek, návrh a možnosti jednoduchej korekcie spektrálnych interferencií v OES-ICP, optimalizácia kalibrácie vlnových dĺžok a konštrukcie analytickej funkcie a veľa ďalších.

Z hľadiska analytickej aplikácie je nutné uviesť jeho práce v oblasti spektrochemického stanovenia stopových prvkov pokrývajúce širokú oblasť geologických materiálov, pričom je osobitne potrebné hodnotiť systematický prístup ku hodnoteniu ich spoľahlivosti, ako aj ich bohaté využitie pri riešení geologicko-geochemických problémov.

Pedagogicko spoločenská činnosť

Prof. Plško je dlhoročným prednášateľom viacerých predmetov, ako optických analytickej metód, metód analytickej geochemie, laboratorneho výskumu geologických materiálov a trendov v analytickej chémii pre poslucháčov Prírodovedeckej fakulty UK, vyškoloval rad vedeckých pracovníkov a ako predseda komisie pre obhajoby kandidátskych dizertačných prác z oboru analytická chémia pri PF UK, člen viacerých komisií pre obhajoby kandidátskych i doktorských dizertačných prác z analytickej chémie a geochemie, ako aj oponent doktorských i kandidátskych dizertačných prác v poslednom štvrtstoročí výrazne prispel v celoštátnom meradle k rozvoju uvedených vedných odborov.

Okrem tejto činnosti bol častým prednášateľom na rôznych odborných školeniach a kurzoch. Svojím jasným logickým a zrozumiteľným spôsobom podávania i náročnej problematiky spešteným dodatkami zo svojho širokokoncipovaného všeobecného vzdelania sa radí k významným pedagogickým špičkám.

Jeho organizátorskú činnosť nevycherpávajú len jeho aktivity pri organizovaní mnohých odborných podujatí i so zahraničnou účasťou, k čomu mu výdatne napomáhajú jeho nezvyčajné jazykové a diskusné schopnosti, ale aj jeho funkcionárska práca v rôznych funkciách vo VTS, Slov. chemickej spoločnosti a najmä Čs. spektroskopické spoločnosti.

Vedecká, organizačne spoločenská činnosť, ako i reprezentácia našej vedy doma i v zahraničí charakterizuje Prof. Plšku ako medzinárodne uznávaného odborníka, ktorý svojou dlhoročnou prácou prispel v značnej miere k rozvoju československej spektroskopie.

Jana Kubová, Vladimír Streško, Geologický ústav UK, Bratislava, Jiří Toman, Unigeo, Brno : Súčasná vedecká činnosť Prof. Ing. E. Plška, DrSc z pohľadu jeho spolupracovníkov

Vyjadriť sa k súčasnej vedeckej práci Prof. Plška nie je vôbec jednoduché, možno je to príliš smelé a určite predčasné. Chceli by sme sa však podeliť s poslucháčmi jeho priťažlivých prednášok s našimi názormi a pohľadmi, získanými z priamych pracovných a osobných kontaktov.

V prvom rade by sme chceli zdôrazniť jeho vlastnosť, vďaka ktorej mu patrí také miesto vo vedeckom svete na akom ho poznáme. A tou je predvídavosť - "zачytenie čerstvej alebo aj skry-

tej stopy" - vo vývoji analytickej vedy a možnosti jej praktického uplatnenia. Táto jeho schopnosť predvídať pramení nielen z hlbokých teoretických vedomostí, bohatých praktických skúseností, ale najmä z ďalšej jeho mimoriadnej vlastnosti - schopnosti syntetizovať znalosti a skúsenosti, hľadať a nachádzať skryté súvislosti medzi požiadavkami praxe a blízkymi alebo vzdialenejšími možnosťami ich riešenia.

Táto predvídavosť ho viedla i k úsiliu získať zariadenie, ktoré by umožnilo zaradiť analytické oddelenie GÚ PF UK v Bratislave medzi pracoviská, ktoré sa podieľajú na rozvoji analytickej spektroskopie s plazmovými zdrojmi v ČSSR. Od r. 1985 sa na GÚ PFUK začíná experimentálna práca v optickej emisnej spektrometrii s indukčne viazanou plazmou. Po nesporné náročnom počiatočnom období, ktoré všetci dobre poznáme, kedy sme sa snažili čo najrýchlejšie zvládnuť prístrojovú techniku, sa "náš Edo" pustil do experimentálnej práce so závideniahodným mladickým elánom. S elánom, ktorý nie je hnaný vidinou rýchlych úspechov, ale ktorý ovplyvňuje vlastnosťami, ktoré ho k úspechu predurčujú. A možno sledovať jeho priamociare riešenia: od získania základných poznatkov a špecifik vlastnej inštrumentácie k praktickým aplikáciám. Od základného štúdia analytických vlastností Ar/Ar výboja k jeho praktickému využitiu pri analýzach geologických materiálov. Nasleduje štúdium zložitejších systémov: výboje s molekulovými plynmi a ich aplikácie pre priamu analýzu pevnej fázy pomocou OES-ICP technikou SET. Dlhé hodiny pri prístroji a v laboratóriu. Dokonalá informovanosť. Popri tom sa riešia otázky vplyvu korekcie pozadia, spektrálnych interferencií i pre zložité prípady stanovenia prvkov vzácnych zemín, kontaminácie pri rozkladoch vzoriek, otázky optimalizácie kalibračného postupu pre široké koncentračné rozmedzie, a ďalšie o ktorých poslucháči jeho prednášok už počuli, resp. budú počuť v najbližšej dobe. A sme presvedčení, že opäť takým spôsobom, ktorý aspoň podnieti k zamysleniu, čo je možné v pomerne skromných podmienkach s malým, ale jeho zásluhou zohraným kolektívom dosiahnuť.

Väčšina jeho prác, podobne ako predošlé výsledky štúdia a využívania "klasických zdrojov", sa okamžite uplatňujú v analytickej praxi a to nielen na akademickej pôde bratislavskej univerzity ale aj v rámci rozsiahlej spolupráce s geologickými, analytickými a ďalšími pracoviskami u nás a v zahraničí. Medzi tieto patrí v poslednom období spolupráca v rámci INTERGEOTECHNIKY a už pomerne dlhotrvajúca spolupráca s Univerzitou M. Luthera v Halle a Univerzitou E. Kardelja v Ljubljane - a to sme spomenuli len tie najbližšie pracovné kontakty, pre ktoré nešetří časom ani energiou.

Pri našej spoločnej práci sa s ním stretávame nielen ako s významným odborníkom, ale tiež majstrom podnetných diskusií, ktorý priamo provokuje "pchať pazúry" do stále nových problémov, vynikajúcim spoločníkom a obetavým kamarátom. Sme presvedčení, že ešte dlho bude túto svoju pozíciu udržiavať a že ešte toho bude veľa, čo bude môcť odbornej verejnosti povedať.

Preto pri príležitosti jeho významného životného jubilea mu prajeme veľa tvorivých síl, zdravia a úprimne sa tešíme na naše ďalšie spoločné diskusie a výsledky jeho práce, ktoré tak priťahujú spektroskopistov všetkých vekových kategórií na jeho odborné vystúpenia.

Juliana Ríšová, Katedra analytickej chémie CHTF SVŠT, Bratislava: Spomienky aspirantky na Prof. Ing. E. Plšku, DrSc

S prof. Plškom som sa prvýkrát stretla v laboratóriu Katedry anorganickej chémie CHTF SVŠT v šk. r. 1953/54, kde na krátky čas som bola k nemu pridelená ako demonštrátorka. Privítal ma, dal mi do ruky receptár fy Agfa, vyznačil mi pracovný postup na prípravu roztokov vývojky a ustalovača a odišiel. Ani jeden z nás vtedy ešte netušil, že tieto dva roztoky nás budú dlhé roky sprevádzať v našej profesionálnej činnosti.

O deväť rokov neskôr sme sa opäť stretli, on uznávaný odborník v atómovej emisnej spektroskopii - školiteľ, ja ako začínajúca externá aspirantka. Nebola som vtedy prvá aspirantka, v tom čase pod jeho vedením dokončovala aspirantúru RNDr. Žofia Rybárová, súbežne so mnou začínala RNDr. Mária Herkeľová, nasledovali Ing. Eliáš Feriančík, RNDr. Mária Španková, RNDr. Mária Žemberiová a RNDr. Jana Kubová. Témy aspirantských prác boli zamerané na riešenie rôznych problémov atómovej emisnej a absorpčnej spektrometrie. Verím, že všetci menovaní budú so mnou súhlasiť, že na učňovské roky pod jeho majstrovským vedením spomíname s vďačnosťou a úctou, nielen pre jeho vynikajúce odborné znalosti, ale aj nesmierny takt a oľadupnosť, ktorými nás prenášal cez všetky úskalia vtedy už rozvinutej vednej disciplíny. Boli aj pochybovači, ktorí boli presvedčení, že optická emisná spektrometria už prekročila svoj zenit a patrí minulosti. A práve jeho láska, viera a profesionálna vynaliezavosť, ktorou pristupoval k riešeniu mnohých na prvý pohľad nie jednoduchých problémov svedčí o schopnosti rozvíjať vednú disciplínu, ktorá sa mi stala srdcovou záležitosťou. Častokrát jeho postoj k práci nás utvrdzoval v správnosť zvolenej aspirantskej témy a v úsilí pokračovať v nastúpenej ceste rozvíjania a rozširovania tejto inštrumentálnej analytickej metódy na Slovensku. Správnosť jeho predpovedí potvrdili aj posledné dve desaťročia prudkého rozvoja inštrumentácie atómovej emisnej a absorpčnej spektrometrii a spracovania nameraných výsledkov.

Sám výborný experimentátor a teoretik vyžadoval od nás pedantnú experimentálnu prácu a presnú formuláciu našich vedeckých výpovedí, rešpektovanie správnej terminológie ale predovšetkým nás viedol k etike vedeckej práce.

Pri spomienke na aspirantské roky nemôžem nespomenúť aj iný nesmierne vzácny rys Prof. Plšku - školiteľa. Tak ako nás majstrovsky odborne usmerňoval o teoretickej a experimentálnej práci, rovnako intenzívne sa staral aj o naše spoločenské a odborné kontakty so svetovými vedeckými špičkovými osobnosťami. Jeho prostredníctvom sme nadviazali mnohé známosti a priateľstvá, uzavreli sa mnohé vedecké spolupráce, odborné stáže na renomovaných svetových pracoviskách, prípadne výmenou sme získali odborné periodiká pre naše knižnice. Tieto stretnutia boli aj vynikajúcou príležitosťou cudzojazyčnej konverzácie ale aj nepriamym podnetom na zdokonalenie sa o tom, ktorom cudzom jazyku. Ako polyglot - dôrazne požadoval aj u svojich aspirantov štúdium cudzích rečí.

Nemôžem pri tejto spomienke na roky vedeckej prípravy nespomenúť aj na príjemné chvíle, ktoré sme strávili v jeho rodine v spoločnosti jeho priateľivej a pohostinnej manželky. Boli to stretnutia niekedy naplnené hudbou v interpretácii

nášho školiteľa, inokedy zase zaujímavé rozhovory, v ktorých taktiež sa snažil rozširovať náš obzor v najrôznejších oblastiach spoločenských a prírodných vied. Udivoval všestrannosťou a dokonalou až odbornou znalosťou v botanike, biológii, geografii, výtvarnom umení, histórii ale aj v kulinárskom umení. V priebehu roku 1989 som sa s Prof.Plškou stretla na dvoch významných odborných podujatiach na Zemplínskej Šírave a v Sofii. Opäť sa tu prejavil ako brilantný prednášateľ, vášnivý diskutér ale aj pozorný poslucháč, ktorý sleduje s nezvyčajným záujmom celé odborné dianie okolo seba. Mladík posadnutý zvedavosťou a záujmom, chystajúci sa práve vstúpiť do siedmej desiatky pracovitého a pre našu spoločnosť prospešného života.

Z príležitosti tohto životného jubilea, v mene všetkých aspirantov, ktorým bol obetavým učiteľom a oddaným priateľom, do ďalších rokov života, prajem predovšetkým dobré zdravie, ďalšie úspechy v práci a veľa spokojnosti.

Kurt Laqua, Dortmund, NSR : Prof.E.Plško 60 years old

Prof.Plško, one of the most prominent members of the international spectroscopic community, or perhaps better said : family, is celebrating his 60th birthday. As one of his colleagues and friends who knows him for more than thirty years I may be allowed to draw attention to some aspects of his scientific achievements and activities which should round up the image of his personality. Although primarily the status and reputation of a scientist is judged by his original scientific work as reflected by his published papers, written books and lectures. This of course is also amply true in this case and will be covered elsewhere. Prof. Plško, however, made also pertaining contributions in fields closely related to direct research work which won him additional reputation. It is my privilege to describe some of these activities :

Over many years Prof.Plško took actively part in the work of the International Union of Pure and Applied Chemistry IUPAC. In 1965 at a rather early age he was elected associate member of the "Commission on Spectrochemical and other optical procedures of Chemical Analysis". He served on this Commission until 1984, from 1967 to 1977 as titular member. This extraordinary long period of service as compared to the normal maximum time of 12 years clearly shows how much his work in the commission was appreciated. During this time the series of documents regarding recommendations on "Nomenclature, Symbols, Units and their Usage in Spectrochemical Analysis" was started from scratch and a number of parts were prepared and published in due course. To all of them Prof.Plško, well suited for this difficult task by his expertise, broad scientific knowledge and critical judgement made significant and substantial contributions, i.e. to Part I General Principles, Part II Statistical Evaluation, Part III Flame Spectroscopy (AES, AAS, AFS), Part IV X-ray Spectroscopy, Part V Radiation Sources, Part VI Molecular Fluorescence Spectroscopy, Part VII Molecular Absorption Spectroscopy, Part VIII New Classification and Notation System for X-ray Wavelengths, Part IX Spectral Isolation and Dispersion of Radiation (not yet published).

From this listing his wide scope of interests, rarely found these days, can be deducted. The importance of these IUPAC recommendations have led to them being printed in relevant journals, eg. Spectrochimica Acta, Applied Spectroscopy, Analytical Chemistry. They are considered the standard source of reference serving authors, editors, instrument manufacturers alike. In addition they form the basis for national standardisation.

Prof.Plško was always a strong advocate of international cooperation and exchange of information. In 1963 it was his initiative and idea to call together spectroscopists from many countries from the East and from the West for the first time after the war in an endeavour to bridge a gap. This symposium held in an almost private atmosphere at Smolenice was a great success. It proved to be an excellent platform for establishing scientific contacts, arranging scientific cooperation and last but not least laying ground for good and lasting friendships. Participants still remember the generous hospitality and the lively discussions lasting until late at night.

In a similar way he opened up new ways by extending then and when national conferences to conferences with international participation e.g. in 1973 in the High Tatra. As always there was an overwhelming hospitality shown by our colleagues from Czechoslovakia.

In 1965 Prof.Plško was awarded an Alexander-von Humboldt-fellowship for advanced research. He spent a year at the Dortmund Institut für Spektrochemie und angewandte Spektroskopie which gave him the possibility to realize some of his ideas with the help of rather good equipment. This time was as happy as successful. There were almost daily discussions with colleagues from all over the world who by coincidence were all working in Dortmund at that time. Eduard Plško excelled by his often unorthodox and unexpected views on the one side and simple straightforward commonsense advice on the other side.

In 1971 on the occasion of the CSI XVI in Heidelberg he was asked to prepare and chair a round table session and afterwards give a lecture at one of the postconferences at the Kernforschungsanlage KFA Jülich.

In 1985 Prof.Plško accepted the invitation of the organizers of the CSI XXIV in Garmisch-Partenkirchen to deliver one of the main lectures at the conference and another lecture at the post-colloquium at the Kernforschungsanlage KFA Jülich.

In the course of time Prof.Plško gave talks at regular colloquia at Dortmund and elsewhere.

All his lectures have something in common: he has something to say, they are well organized and they are lucidly presented. And, as we all know, he can deliver them equally well in any one of the many languages which he so effortlessly speaks.

This report will not be complete without mentioning his beloved wife Viktoria. What would he be without her? During a long happy marriage she has always been the other supplementing focal point in his life. Everybody who ever enjoyed the warm hospitality in their lovely home will not forget it.

Eduard Plško has always been a very good and reliable friend. It is a pleasure and an honour to wish him many happy returns of the day, good health and work as successful as that in the past for a long time to come.

Károly Zimmer, Eötvös Universität, Budapest, Hungary : Prof.Plško is 60 years old

"Jó napot kívánok" (Good morning) - raised an unknown young man his hat to us at the VII. Colloquium Spectroscopicum Internationale (CSI) in Liège, 1958, on the exhibition of instruments at the stand of the Hungarian firm Metrimpex where about 12 spectroscopists from different parts of the whole world talked

in Hungarian. - "I am Eduard Plško from Bratislava". The Slovakian colleague speaks Hungarian as well as he speaks at least 14 other languages. For him and me this was the first participation in CSI.

From that time began our more than 30 years old acquaintance, what lead to a good friendship. He is well-known in every country of the world where spectroscopists are living and working. I am sure, not even he could tell, from how many languages to how many others he interpreted officially in his life.

I don't think, that there was a year, in which we did not meet on one or other conference; it there was one, then it was sure, that in an other year we met even more times.

Since that time Prof. Plško has participated in all CSI organized in Europe and overseas CSI in Ottawa (1967).

In the majority of attended CSIs he presented scientific contributions and as consequence of his broad scientific activities, beginning with the XV. CSI in Madrid (1969) he has been invited as speaker, chairman of panel discussion etc. to almost all CSI.

It can be valued as main merit of Prof. Plško that the XX. CSI was held in Prague where he was one of the leading organizers contributing to the successful performing of this event.

The XXVI. CSI in Sofia in this year has been already the 15th attended by Prof. Plško.

The series of Conferences on Analytical Atomic Spectroscopy (CANAS) started practically by the 2nd Czechoslovak Spectroscopic Conference in Tatranská Lomnica (1959). At that time Prof. Plško was already involted in its organization.

With exception of only one, he attended all CANAS and presented contributed and/or invited lectures.

Apart from the above mentioned great international conferences, Prof. Plško absolved numerous lecture stays (U.S.A., Netherlands, F.R.G., Austria) and participated in numerous national conferences in several countries (GDR, Yugoslavia, Turkey, Bulgary, Hungary) where he presented invited lectures of extraordinary scientific interest.

I will not go into detail concerning the topic of his lectures held in Hungary: in Veszprém, Budapest, Debrecen, Eger, Mátfařed and Sopron. He played an important role in the elaboration and successful realization of the Hungarian-Czechoslovak scientific cooperation contract in the field of spectroscopy.

I wish to mention that before the XII. CSI held in Exeter we had an appointment in London, in front of the British Museum. From that place we travelled together in his Škoda car to Exeter (which, otherwise, was admired by many people on the way, this type of car was rather rare in the United Kingdom): the driver was Edo (this is his nickname), I studied the map sitting at the rear if we had to change the direction, and his wife, Vikta repeated every five minute "keep left". It is well known, that on the old continent cars travel on the right side. So we arrived luckily in Exeter without accident.

What concerns problems dealt with in his lectures presented at the enumerated scientific lectures it is no exaggeration to say that Prof. Plško covered practically the whole analytical atomic

spectroscopy in a variety not reached by other scientists. In proof of this statement it is enough to mention at least the following main contributions of Prof. Plško to the general development of atomic spectroscopy presented at different occasions: Elucidation of the mechanism of sifter electrodes, use of copper sheet electrodes, introduction of evaporation relation curves, new approaches to standard addition technique and to the correction of spectral interferences in ICP, study of matrix effect, laser microanalysis and mainly his works devoted to the application of statistical methods to the processing of spectroanalytical data. He was interested in the distribution of spectrochemical results, as well as of contents of elements for which he proposed a solution applicable for trace, middle and main components. In the connection with the last topic, Prof. Plško's work on optimization of standard addition technique and of the use of internal reference element (1963) preceeded the formation of chemometry devoted to the solution of similar problems. His activity in the basic investigation has always been connected with the solution of analytical problems like the analysis of high purity materials, geological samples, determination of gold, rare earth elements and with the analysis of mineral waters.

The enumeration would not be complete without to honour the art of presentation even in important foreign languages (English, German, Russian, French, Hungarian) which is marked by high professionalism what concerns not only the content but also the artistic side making pleasure to the whole audience. In this connection mainly his contribution to the round table discussion in Debrecen (1987), his lecture in Schwerin (1989) and in Sofia (1989) have to be mentioned as masterpieces of rethorics.

It would be difficult to give a full image about the "versatility" of Prof. Plško. He gave humorous birth-day toast on Latin language, he played the piano excellently many times after the conference banquets, in good humour, and after drinking a few glasses of wine, he sang nicely different popular songs even better than the hosts.

Prof. Plško says that after his 60th birthday he will withdraw from the scientific work which plays till now in his life a central role. I can hardly imagine this. But, if it will be so, then he will, no doubt, withdraw to his country house and garden to have a passion for his hobbies which were overshadowed in the last decades because of the lack of time, among others the possibilities to entertain his guests with drinks and foods, spiced with condiments collected from all parts of the world.

We wish him to do his hobbies for many decades more in the company of his wife Vikta with such an enthusiasm as till now he did his favourite scientific topic, the atomic spectroscopy.

Edo šedesátníkem

(osobní hold)

Jak rychle ten čas letí ! Sice už to je nějaký ten pátek, ale rozhodně se to nezdá být 30 let, co jsem blíže poznal našeho oslavence. Psal se rok 1959 a byl to rok velice významný pro Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze se sídlem na katedře metalurgie VŠCHT, prekursora to Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV. Toho roku, po desetileté přestávce, tato společnost pořádala 2.Čs.spektroskopickou konferenci a mezi hlavními iniciátory i organizátory byl právě Edo. Rok 1959 byl 100. výročím vzniku analytické spektroskopie, jež se obvykle ztotožňuje s publikací Kirchhoffa a Bunsena v Zeitschrift für Physik. Zda pod touto zámi kou či zda osobním působením, to není teď důležité, faktem však je, že se organizátorům podařilo zajistit tak neobvykle vysoký počet zahraničních spektroskopiků, především z Polska, Maďarska a NDR, že konference v Tatranské Lomnici z r. 1959 se počítá za první v řadě spektroskopických konferencí socialistických zemí, které dnes nesou označení CANAS.

Revolučnost počínů uspořádat konferenci s velkou mezinárodní účastí si dnes již neuvědomujeme, je však nepopíratelné, že touto iniciativou se dokonale rozhýbaly stojaté vody tehdejšího Sdružení. Jelikož aktivita je autokatalyzující, spektroskopické konference se nejen dále opakovaly, ale rostla jejich kvalita i účast zahraničních spektroskopiků, až se Čs.spektroskopická společnost v r. 1977 podujala úkolu zorganizovat XX. CSI a 7. ICAS. Kandidatura byla, jak víme, bez problémů přijata.

A proto bych dnes chtěl v našem ctihodném šedesátníkovi vzdát hold tomu ještě ne zcela třicetiletému princí za probuzení spící Růženky k aktivnímu životu.

Ivan Rubeška

Československá spektroskopická společnost při ČSAV
adresa sekretariátu : 160 00 Praha 6, Kozlovská 1

Redakce : Dr.Milan Fara, CSc

Techn.redakce : P.Vampolová. Redakční uzávěrka leden 1990

Pouze pro vnitřní potřebu