



Československá spektroskopická společnost

Bulletin

Čs. spektroskopická společnost
336

160 00 PRAHA 6, Kozlovská 1

63
1991

Bulletin
Čs.spektroskopické společnosti

Číslo 63	prosinec 1991
Obsah	str.
Zprávy ze Společnosti	4
SEKCE OPTICKÉ ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE	
- 6.čs.konference o atomové spektroskopii (2.-6.9.1991)	12
- seminář Využití výpočetní techniky v automatické spektrometrii k řízení výroby a zpracování dat (23.-25.9.1991)	13
SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE	
OS spektroskopie pevného stavu	14
OS magnetické rezonanční spektroskopie 7.seminář NMR - Valtice 1991	15
OS vibrační spektroskopie Seminář o infračervené spektroskopii v chemii polymerů	17
SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD	
OS instrumentálních radioanalytických metod Konference o instrumentální aktivační analýze IAA 91 Seminář o mezinárodních konferencích	19 21
OS Mössbauerovy spektroskopie	23
OS rentgenové spektrometrie	23
KOMISE	
Komise pro standardy a referenční materiály Seminář "Referenční materiály v chemické analýze (7.-11.10.1991)	24
REFERÁTY	
PROF.RICHARD R.ERNST - nositel Nobelovy ceny za chemii (Prof.Zbyněk Ksandr, CSc)	26
PRAKTICKÉ ZKUŠENOSTI S AKREDITACÍ ZKUŠEBNÍCH LABORATORŮ (Karel Kult)	27
33rd IUPAC CONGRESS (Budapest, 17.-22.8.1991) (Ing.Dana Koliňová, CSc)	30

BULLETIN OF THE CZECHOSLOVAK SPECTROSCOPIC SOCIETY

No. 63

BRIEFLY FROM CONTENT

THE SOCIETY LIFE

(see page 4)

Survey of the Society Committee's activities during 1991 :

- Dr. Jan Mráz, C.Sc., the former chairman of the Society resigned because of his new position in the private company. New elections were carried through July 24th 1991 and resulted in the following changes of the offices :
Chairman of the Czechoslovak Spectroscopic Society
Associate Professor Ing. Karel Volka
II. vice chairman
RNDr. Zdeněk Slovák
Scientific Secretary
RNDr. Miroslav Ryska
Organizational Secretary
Ing. Věra Spěváčková
- Head of the professional group for Mass Spectroscopy
Ing. Petr Verner
- Associate Professor Karel Volka will represent the Society at IUPAC since 1991
- Considerable reduction of the fees for Society's events will be granted for the students, they will be fully exempted from paying the conference fee at the 9th Czechoslovak Spectroscopic Conference
- prize winners of the Young Spectroscopists Contest
1st prize Dr. Ladislav Půček
2nd prize Dr. Pavel Matějka, Dr. Petr Pracna
3rd prize Ing. Tomáš Paukert, Dr. Zdeněk Weiss
- Jan Marek Marci medal awarded to RNDr. Milena Závětová. Festive handing of the medal to Milena Závětová for her life-long work in the fields of the solid state spectroscopy took place on the meeting of the Central committee of the Czechoslovak Spectroscopic Society. Associate Professor Karel Volka gave a talk on Milena Závětová work activities (see page 9)

SOCIETY ACTIVITIES

OPTICAL ATOMIC SPECTROSCOPY

- 6th Czechoslovak Conference on Atomic Spectroscopy (74 lectures and posters, 132 participants, exhibition of 12 companies. Detailed report see page 12)
- Seminar on the use of computers in the automatized spectrometry (15 lectures, 31 participants) (see page 13)

MOLECULAR SPECTROSCOPY

- Meetings of the Solid State Spectroscopy Group (see page 14)
- 7th NMR seminar Valtice 1991 (23 lectures, 38 participants) (see page 15)
- Seminar on the IR spectroscopy in the chemistry of polymers (VÚKI-Bratislava 1990) (see page 17)

SPECIAL SPECTROSCOPIC METHODS

- Conference on Instrumental Activation Analysis IAA '91 (33 lectures, 43 participants) (see page 19)
- Seminar on the International Conference (see page 21)
- Workshop of the Mössbauer spectroscopy group (see page 23)
- Seminar on the X-ray spectrometer PW 1660 X'Cem (2 lectures, 47 participants) (see page 23)
- Seminar Reference materials in the chemical analysis (28 lectures, 44 participants) (see page 24)

REVIEWS

- Professor Richard R. Ernst - Nobel prize winner (Z. Ksandr) (see page 26)
- Experiences with the accreditation of the laboratories (K. Kult) (see page 27)
- 33rd IUPAC Congress (D. Koliňová) (see page 30)

ZPRÁVY ZE SPOLEČNOSTI

PŘEHLED ČINNOSTI PŘEDSEDNICTVA A HLAVNÍHO VÝBORU SPOLEČNOSTI V r. 1991

Předsednictvo hlavního výboru Čs. spektroskopické společnosti se sešlo v r. 1991 celkem 14 krát. Mimo běžnou agendu se zabývalo zejména řešením ekonomické situace Společnosti, některými personálními změnami ve vedení Společnosti, problematikou mezinárodní spolupráce a přípravou 9. československé spektroskopické konference v r. 1992.

Změna ekonomických podmínek pro pořádání konferencí a seminářů způsobila počátkem roku nemalé starosti organizačnímu výboru 6. československé konference o atomové spektroskopii (viz dále zprávu o jejím konání), při níž se jedno z rozpočtových dilemat podařilo vyřešit vydáním sborníku konference na disketách.

V únoru bylo rozhodnuto, že po vypršení dvouletého období, po něž zastupoval Společnost v IUPACu Dr. Ivan Rubeška, bude pro další období zástupcem Doc. Karel Volka. Současně bylo rozhodnuto, že kongresu IUPACu v Maďarsku se zúčastní Ing. Dana Kolihová, přičemž se využije možnost krytí nákladů v rámci spolupráce s maďarskou společností GTE.

Ing. Nikl (přístrojová komise) připravil k uveřejnění první přehled fondu nabídky a poptávky použitých spektroskopických přístrojů a zařízení. Fond nabídky a poptávky bude dále doplňován; čtenáři Bulletinu mohou tuto službu nadále využívat (informace podá sekretariát Společnosti).

V zájmu podpory nejmladší generaci spektroskopiků rozhodlo předsednictvo o poskytování slevy na konferenčních poplatcích u akcí Společnosti pro studenty z ČSFR.

V dubnu požádal o uvolnění z funkce předsedy Společnosti Dr. Jan Mráz. Stalo se tak z důvodu jeho přechodu do podnikatelské sféry v oboru příbuzném zájmu Společnosti. Předsednictvo rezignaci s politováním přijalo a rozhodlo, že do nejbližší schůze hlavního výboru budou funkce předsedy vykonávat místopředsedové.

V květnu zastupoval Dr. Miroslav Ryska Společnost na zasedání vědeckých společností ČSAV, zaměřeném na grantové projekty v rámci spolupráce s univerzitami v USA a příp. v Izraeli.

Dne 12. června 1991 se na VŠCHT v Praze konala 51. schůze hlavního výboru Čs. spektroskopické společnosti. V jejím úvodu

byly předány ceny vítězům soutěže mladých spektroskopiků za rok 1990 (výsledky soutěže viz Bull. č. 62/1991, str. 6 a resumé prací na str. 30-32).

Vlastní program schůze byl zahájen projednáním návrhu personálních změn, který připravilo předsednictvo v souvislosti s rezignací Dr. Mráze. Výsledkem voleb pak byly následující změny v obsazení funkcí :

předseda Čs. spektroskopické společnosti	Doc. Ing. Karel Volka, CSc
II. místopředseda	RNDr. Zdeněk Slovák, CSc
vědecký tajemník	RNDr. Miroslav Ryska, CSc
organizační tajemník	Ing. Věra Spěváčková, CSc

Členové hlavního výboru byli dále seznámeni s dopisem Doc. Ing. Miloše Nepraše, DrSc, jímž požádal o uvolnění z funkce vedoucího OS elektronové spektroskopie a fotochemie. Hlavní výbor vyslovil souhlas a rozhodl otázku vedení OS projednat za účasti Doc. Nepraše.

Byl přijat návrh Prof. Eduarda Plška, DrSc, aby Dr. Mrázovi a Doc. Neprašovi byl vysloven dík za dlouholetou práci pro Společnost formou dopisu.

Ve zprávě o odborné činnosti za 1. pololetí 1991 byly uvedeny následující akce :

- seminář sekce optické atomové spektroskopie o možnostech stanovení nízkých koncentrací rtuti
- kurs měření vibračních spekter za účasti zástupců firem NICOLET a ZEISS a 3 přednášky OS spektroskopie pevného stavu v rámci sekce molekulové spektroskopie
- v rámci sekce speciálních spektroskopických metod pak 2 akce OS rtg spektrometrie s účastí zahraničních firem PHILIPS a ARL
- schůze OS hmotnostní spektrometrie ve spolupráci s firmou FINNIGAN
- konference IAA 91, již uspořádala OS instrumentálních radioanalytických metod se spoluúčastí firem SILENA, CANBERRA a TESLA-Přemyšlení.
- seminář komise pro spektrometrické metody monitorování životního prostředí.

Na rok 1992 byly zařazeny do plánu činnosti akce :

- kurs interpretace vibračních spekter
- konference o spektroskopii s vysokým rozlišením
- seminář OS rtg spektrometrie
- seminář OS lokální elektronové mikroanalýzy
- 4. škola hmotnostní spektrometrie
- konference IAA 92

Podrobně byly diskutovány předpoklady pro uspořádání 9. čs. spektroskopické konference. Byl přijat návrh, aby konference byla pouze třídenní. Upřesnění realizace konference bude provedeno po vyhodnocení předběžného zájmu s uzávěrkou v září 1991. Komise pro standardy a referenční materiály uspořádá v rámci konference výstavu referenčních materiálů.

Hlavní výbor vyslovil souhlas s návrhem OS spektroskopie pevného stavu na udělení plakety Jana Marca Marci RNDr. Mileně Závětové, CSc za její celoživotní dílo ve spektroskopii. Plaketa

bude předána na schůzi hlavního výboru v prosinci 1991.

Bylo konstatováno, že přes veškeré úsilí se nepodařilo zajistit oficiální zastoupení Společnosti na CSI v Bergenu. Tato skutečnost byla dále podrobněji diskutována spolu s problematikou dotací z ciziny na podporu čs.vědy. Bylo rozhodnuto, že ministr Vavroušek bude informován zvláštním dopisem o činnosti komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí.

Na schůzi předsednictva v červenci byl za člena revizní komise jmenován Ing.Dušan Vopálka a bylo rozhodnuto, že se 9.čs.spektroskopická konference uskuteční v době od 22. do 24. června 1992.

Záříjové zasedání předsednictva konstatovalo úspěšný průběh 6.čs.konference o atomové spektroskopii, včetně jednání s Prof.Wegscheiderem, zastupujícím Rakouskou chemickou společnost. Kurs optické emisní spektroskopie s indukčně vázaným plazmatem by se měl uskutečnit v březnu 1992.

Na 9.čs.spektroskopickou konferenci došlo do poloviny září přes 150 předběžných přihlášek. Předsednictvo rozhodlo, aby se Dr.Fara pokusil zorganizovat celou konferenci v areálu zemědělské fakulty Jihočeské university v Českých Budějovicích.

Federální výbor pro životní prostředí přijal nabídku Společnosti na odbornou spolupráci při organizování nových projektů v oblasti analytiky životního prostředí.

V říjnu byl aktualizován seznam přístrojů ve fondu nabídky a poptávky. Seminář o analýze olejů bude uspořádán v září 1992; k jeho realizaci přispělo úsilí místopředsedy Společnosti Ing. Streška, kterému se podařilo vytvořit perspektivní organizační zázemí na Slovensku.

Se změnou majitele domu podle zák. č. 87/1991 Sb. bude nutné přemístit sekretariát Společnosti.

Vedoucím OS hmotnostní spektrometrie byl zvolen Ing.Petr Verner. Do soutěže mladých spektroskopiků bylo v r. 1991 podáno celkem 7 přihlášek.

V listopadu jednali Doc.Volka a Dr.Fara v Českých Budějovicích o realizaci 9.čs.spektroskopické konference. Díky spoluprádátelství s Jihočeskou universitou a pomocí Společných laboratoří Sdružených biologických pracovišť ČSAV v Českých Budějovicích bylo možné stanovit konferenční poplatek pro členy Společnosti 700,- Kčs. Po těchto přípravných jednáních byl v prosinci připraven druhý cirkulář pro konferenci. Jako novinka byli studenti z ČSFR osvobozeni od konferenčního poplatku a výrazná sleva je poskytována i studentům ze zahraničí.

Dne 9.prosince 1991 se uskutečnila 52.schůze hlavního výboru Československé spektroskopické společnosti. Schůze se konala opět na VŠCHT v Praze a řídil ji místopředseda Společnosti Ing. Vladimír Streško, CSc. Úvodem schůze předal předseda Společnosti Doc.Volka plaketu Jana Marca Marci Dr.Závětové (viz dále).

Zprávu o činnosti předsednictva za 2.pololetí 1991 přednesla Ing.Spěváčková. Jako hlavní činnost uvedla přípravu 6.čs.konference o atomové spektroskopii v Brně (září 1991), přípravu 9.čs.spektroskopické konference s mezinárodní účastí v r. 1992, hodnocení soutěže mladých spektroskopiků, projednání personálních změn ve vedení OS hmotnostní spektrometrie a zprostředkování prodeje přístrojů z fondu jejich nabídky a poptávky.

Dr.Čermáková přednesla návrh na vyhodnocení soutěže mladých spektroskopiků za r. 1991 a konstatovala, že všechny zaslané práce měly dobrou úroveň. Po diskusi rozhodl hlavní výbor o udělení cen :

- | | |
|---------|------------------------------------|
| 1. cena | Dr.Ladislav Půček |
| 2. cena | Dr.Pavel Matějka , Dr.Petr Pracna |
| 3. cena | Ing.Tomáš Paukert, Dr.Zdeněk Weiss |

Pro další ročníky budou vypracována kritéria pro posuzování těch prací, kde je více spoluautorů; posudky budou vyžadovány od fundovaných oponentů, kteří budou navíc znát pracoviště autorů tak, aby mohli zodpovědně posoudit i podíl účasti soutěžících.

Dr.Ryska přednesl plán odborných akcí na r. 1992. Hlavní akcí Společnosti bude 9.československá spektroskopická konference ve dnech 22.-24. června v Českých Budějovicích. Předsedou organizačního výboru je Dr.Fara. Konference bude organizována v areálu zemědělské fakulty Jihočeské university a v přednáškovém sále Sdružených biologických pracovišť ČSAV. Byl schválen předběžný rozpočet konference a stanoven konferenční poplatek pro členy Společnosti 700,- Kčs a pro ostatní 1050,- Kčs. Ubytování bude zajištěno v kolejích JU, v autokempu a v hotelu Gomel. Studentům bude prominut konferenční poplatek a ubytování poskytnuto za studentské taxy v kolejích. Každá sekce může pozvat maximálně 3 hosty na náklady konference. Byl schválen text druhého cirkuláře, který bude rozeslán do konce roku. Ing.Kučera doporučuje uskutečnit sekci referenčních materiálů, spojenou s výstavou referenčních materiálů a s finančním příspěvkem vystavovatelů. Dr.Schneeweiss navrhl, aby zahraničním studentům byla poskytnuta výrazná sleva na konferenčním poplatku. Návrh byl akceptován.

Dr.Musil přednesl zprávu o činnosti sekce optické atomové spektroskopie, Dr.Urban o činnosti sekce molekulové spektroskopie a Dr.Ryska přednesl zprávu o činnosti sekce speciálních spektroskopických metod. Dále přednesli vedoucí komisí zprávy o činnosti jednotlivých komisí. (Přehled je uveden níže).

Dr.Ryska podal informaci o připravované konferenci "Československo - Evropa - svět", která se má uskutečnit pod záštitou prezidenta ČSFR ve dnech 25.6. - 2.7.1992. Program je rozložen do 17 tématických celků. Byla posuzována možnost aktivní účasti Společnosti, která je ale problematická vzhledem k dosud nejasnému profilu jednotlivých témat.

Zprávu o hospodaření Společnosti přednesla Ing.Kolihová. Úsporná opatření i zvýšení členských příspěvků se projeví příznivě.

Hlavní výbor vyslovil souhlas s návrhem Ing.Kučery, ucházet se o uspořádání konference Nuclear Activ. Techniques in the Life Sciences v Praze v r. 1993. Návrh je nutno podat do 15.ledna, vložné se předpokládá max. 200 USD a lze požádat o sponzorování ministerstvo životního prostředí.

Dr.Fara přednesl zprávu o ediční činnosti Společnosti. V r. 1991 byla vydána dvě čísla Bulletinu.

Přehled činnosti Společnosti v r. 1991 :

Sekce optické atomové spektroskopie :
- 6.čs.konference o atomové spektroskopii (74 přednášek a posterů, 132 účastníci, výstava 12 firem)

- seminář o možnostech stanovení nízkých obsahů rtuti (9 přednášek, 72 účastníci)
- seminář o využití výpočetní techniky v automatické spektrometrii (15 přednášek, 31 účastník)

Sekce molekulové spektroskopie :

- kurs měření vibračních spekter s předváděním přístrojů firmy NICOLET a JENAOPTIK
- přednáška prof. Moskowitse z Kanady
- přednáška prof. Keiderlinga z USA
- seminář s předvedením přístrojů PERKIN-ELMER
- 5 přednášek uspořádaných OS spektroskopie pevného stavu (z toho 4 zahraničních odborníků)
- 7. seminář OS NMR ve Valticích (23 přednášek, 38 účastníků)

Sekce speciálních spektroskopických metod :

- OS rtg spektrometrie :
 - seminář Software UNIQUANT (3 přednášky, 31 účastník)
 - seminář výměna zkušeností z různých laboratoří ČSFR (8 přednášek, 42 účastníci)
 - seminář RTG spektrometr PW 1660 - X'Cem (2 přednášky, 47 účastníků)
 - seminář o aplikaci rtg difraktometrie a spektroskopie při řízení jakosti výroby (společnost CONMET)
- OS instrumentálních radioanalytických metod :
 - konference IAA 91 (33 přednášky, 43 účastníci) s účastí zahraničních firem
- OS hmotnostní spektrometrie :
 - 22. schůze - seminář firmy FINNIGAN (3 přednášky, 42 účastníků)
 - 23. schůze
- OS elektronové a iontové spektroskopie :
 - přednáška prof. Šatavy

Komise :

- 7. seminář komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí (32 přednášky, 56 účastníků)
- seminář o referenčních materiálech (28 přednášek, 44 účastníci)
- přednáška prof. Byrne z Jugoslávie

(Podrobnosti k jednotlivým akcím jsou uvedeny v dalších oddílech podle jednotlivých sekcí.)

UDĚLENÍ PLAKETY JANA MARCA MARCI DR. M. ZÁVĚTOVÉ

Na 52. schůzi hlavního výboru Československé spektroskopické společnosti dne 9. prosince 1991 byla slavnostně předána plaketa Jana Marca Marci RNDr. Mileně Závětové, CSc. Ze zdůvodňujícího návrhu, který předložil hlavnímu výboru Společnosti vedoucí OS spektroskopie pevného stavu RNDr. Jan Polecha, CSc. a který na schůzi hlavního výboru přednesl předseda Společnosti Doc. Volka, dále uvádíme alespoň nejdůležitější fakta.

RNDr. Milena Závětová ukončila matematicko-fyzikální fakultu Karlovy university v r. 1956. V témže roce nastoupila v Laboratoři optiky ČSAV (později přejmenované na Ústav fyziky pevných látek ČSAV) a z něj do Fyzikálního ústavu ČSAV, kde pracuje dodnes v oboru optických vlastností a infračervené spektroskopie pevných látek, zejména polovodičů. V letech 1968 až 1969 byla na dlouhodobém pobytu na University of Maryland. Po návratu zavedla studium amorfního křemíku v Československu.

Z jejích více než 160 odborných prací budiž pro ilustraci připomenuty kapitoly v monografiích :
Optical transitions of electrons in covalent semiconducting glasses (spoluautor B. Velický) v Optical properties of solids. New developments. North Holland 1976, Ion implanted hydrogenated a-silicon (spoluautor I. P. Akimchenko) v Tetrahedrally bonded amorphous semiconductors. Plenum Press 1985 a Optical and photo-electrical properties of a-Si:H implanted by Mg ions (spoluautor A. I. Akimchenko) v Disordered Semiconductors. Plenum Press 1987.
RNDr. Milena Závětová byla odměněna cenou ČSAV v r. 1970, společnou cenou ČSAV a AV SSSR v r. 1986 a v r. 1985 získala čestné uznání JČSMF.

Rozsáhlá je i její vědecko organizační činnost převážně přímo spojená s oborem spektroskopie.

Členka redakčního kruhu Čs. čas. fyz. od r. 1970 a členka Editorial Board časopisu Solar Energy Material od r. 1980, členka mezinárodní vědecké rady Institute for Amorphous Studies (USA) od roku 1982, vedoucí OS spektroskopie pevného stavu v letech 1976 až 1989 (před r. 1976 důvěrník ČSSSp ve FzÚ), aktivní členka organizačních výborů XX. CSI a konferencí ČSSSp, iniciátorka soutěže mladých spektroskopiků, vědecká sekretářka a členka předsednictva Čs. spektroskopické společnosti v letech 1978 až 1989 a členka hlavního výboru JČSMF od r. 1990.

Po slavnostním předání plakety poděkovala Dr. Závětová v krátkém proslovu za udělenou poctu a mj. uvedla, že plaketa Jana Marca Marci je vysoce oceňována v zahraničí jako uznání předním spektroskopikům a že pro ni osobně představuje i povzbuzení k další práci pro spektroskopii.

Za Miloslavem Dvořákem

Dne 5. listopadu 1991 jsme se naposledy rozloučili s panem Miloslavem Dvořákem, dlouholetým členem a funkcionářem Československé spektroskopické společnosti.

Stál u zrodu bývalého Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze a výraznou měrou se podílel na jeho transformaci v Československou spektroskopickou společnost při ČSAV.

Celý svůj aktivní život věnoval aplikovanému výzkumu v oboru emisní atomové spektroskopie, zejména analytickým metodám.

S jeho jménem je spojen rozvoj spektrografické analýzy, vizuální spektroskopie a automatické spektroskopie v našem státě. Vychoval desítky odborníků pro průmyslové spektrochemické laboratoře.

Těžce nemocen zákeřnou chorobou odborně pracoval prakticky do posledních chvil svého života.

V panu Miloslavu Dvořákovi ztrácíme talentovaného odborníka, neúnavného pracovníka a zvláště člověka s ryzím srdcem, obětavého přítele a kamaráda.

Skláníme se v úctě před jeho prací a jeho lidstvem a pokud jsme nestačili za jeho života mu dostatečně vyjádřit naše poděkování, pak to činíme nyní alespoň touto vzpomínkou.

Nechť zůstane stále v našich myslích a srdcích i v odkaze našim následovníkům.

Předsednictvo hlavního výboru
Čs. spektroskopické společnosti

Vzpomínka na profesora Starého

Dne 3.10.1991 zemřel po krátké těžké nemoci ve věku 58 let prof. RNDr. Jiří Starý, DrSc, který byl předním odborníkem, v oboru extrakce, komplexních sloučenin, radiochemii a analytické chemii. Od roku 1958 působil na Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské, kde vychoval celou řadu studentů a aspirantů. Profesor Starý byl výraznou vědeckou osobností, o čemž svědčí i to, že již svých 32 letech dosáhl vědecké hodnosti DrSc na základě disertační práce "Studium extrakce chelátů". Jeho první monografie "The Solvent Extraction of Metal Chelates" patří již mezi klasická díla, dodnes v praxi hojně používaná. Kromě této monografie uveřejnil profesor Starý dalších 7 monografií ve spolupráci s dalšími významnými světovými odborníky, více než 100 originálních prací a řadu přehledných článků v mezinárodních časopisech. Byl zván jako přednášející na mezinárodní konference a jeho práce o extrakci oxinátů, která vyšla v Anal. Chim. Acta 28, 132(1963) byla zařazena jako nejčastěji citovaná práce v Citation Classic. V oboru radioanalytických metod je nutné uvést i objev substechiometrie a vypracování řady metod, využívajících v široké míře výhod použití radioaktivních izotopů. Největším zájmem profesora Starého byla chemie komplexních sloučenin, kde se stal světově uznávaným odborníkem svým přínosem při stanovení konstant stability. O tom svědčí i to, že byl v letech 1969-89 členem IUPACu a redakčních rad tří mezinárodních časopisů. Odchodem profesora Starého ztrácí chemická veřejnost nesmírně všestranného, pracovitého, nezištného a obětavého člověka.

Ing. Věra Spěváčková, CSc

SEKCE OPTICKÉ ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE

ZPRÁVA O 6.ČESKOSLOVENSKÉ KONFERENCI O ATOMOVÉ SPEKTROSKOPII

Ve dnech 2. - 6.září 1991 proběhla v areálu Masarykovy university Brno VI.Čs.konference o atomové spektroskopii. Konference se zúčastnilo 90 domácích a 40 zahraničních spektroskopiků. Významnou skupinu tvořili kolegové z Rakouska, všichni z Grazu, kteří byli formálně spoluorganizáteli této konference. I když do vlastní organizace nezasáhli, po odborné stránce přispěli k úrovni konference a jejich účast je dobrým příslibem pro zintenzivnění mezinárodní spolupráce ve středoevropském regionu v příštím období. Čs.spektroskopická společnost převzala závazek zprostředkování vzájemné informovanosti o připravovaných odborných programech.

Technické zajištění konference bylo díky záštitě rektora, spoluorganizátorů MU a sponzorům na dobré úrovni. Vážné podmínky účastníků nebyly zaznamenány. Náklady na konferenci se podařilo udržet v přijatelných mezích. Součástí konference byla firemní výstava s překvapivě vysokou účastí prakticky všech významných firem, iniciovaná vstřícným postojem fy. Perkin-Elmer. Účast firem přispěla i významnou měrou k odborné aktivitě konference (Dr.Welz, Prof.Falk, Dr.Ure). Firma Perkin-Elmer představila na konferenci svůj nový přístroj AAS ETA model 4100 ZL a u této příležitosti financovala úvodní banket, firma Unicam Analytical financovala úspěšnou exkurzi účastníků na Jižní Moravu. Obě tyto akce byly kvitovány účastníky s uznáním a povděkem. Příspěvky ostatních firem pomohly k udržení finanční rovnováhy konference. Díky sponzorům a výhodám plynoucím ze spoluorganizátorství MU (sál, ubytování, stravování) bylo možno udržet konferenční poplatek pro čs.účastníky na nízké úrovni a zároveň významně snížit účastníkům výdaje na pobyt a stravu.

Součástí konference byly přednášky plenární, sdělení ve dvou sekcích s měnící se tematikou a postery (29). Celkem bylo přihlášeno 45 přednášek a považujeme za jedinečný úspěch konference, že pouze 2 přednášky musely být odřeknuty z důvodu absence (Bulsko, Polsko a Gomišček, Slovinsko). Plenární přednášky byly prosloveny zahraničními špičkovými odborníky - Welz, Mermet, Falk, Matoušek, Ure, Wegscheider, Tsalev, Záray, Kántor,

Niebergal, Wennrich - ale i našimi předními odborníky. Tematicky převažovala AES-ICP, problematika separačních a koncentračních technik a aktuální způsob dávkování vzorku (FIA). S potěšením lze konstatovat, že byl i dostatek aplikačních sdělení domácích účastníků, přičemž všechna jednání konference probíhala výhradně ve světových jazycích. Z technických a ekonomických důvodů nebyl vydán klasický sborník, který byl nahrazen záznamem na disketě v ASCII kodu. Tento způsob byl přijat bez komentáře, což ukazuje, že vydávání tištěných materiálů pro praxi není rozhodující a že náhrada sborníku disketou značně ulehčí rozpočtu. Tyto závěry potvrzuje fakt, že žádosti o xerokopie za úplatu nebyly uplatněny. Domníváme se, že tištěné materiály určitých akcí by se i v budoucnosti mohly omezit jen na program a adresář. Na vyžádání se mohou pořizovat na místě xerokopie ze sborníku, distribuovaného účastníkům na disketě.

Dr.Ivan Novotný, CSc, Dr.Zdeněk Slovák, CSc
za organizační výbor

SEMINÁŘ VYUŽITÍ VÝPOČETNÍ TECHNIKY V AUTOMATICKÉ SPEKTROMETRII K ŘÍZENÍ VÝROBY A ZPRACOVÁNÍ DAT

se konal v Řece ve dnech 23. - 25.září 1991, a to ve spolupráci s Tříneckými železárnami, a.s. Třinec. Zúčastnilo se ho přes třicet specialistů z oboru automatické spektrometrie a odezvělo na něm 12 orálních příspěvků. Do programu byla zařazena i sekce posterů. Program semináře připravil a řídil Ing.Zdeněk Kuboň.

Seminář umožnil poznání výrobních programů, přístrojové techniky a jejího softwarového vybavení v oblasti OES, včetně software automatických laboratorních systémů firem ARL, Spectro a Hilger.

Přednášky a vystoupení uživatelů této přístrojové techniky vhodným způsobem dokumentovaly jejich plné nasazení nejen v laboratořích a zkušebnách, ale i jako významného pomocníka při řízení technologických procesů.

Na závěr semináře bylo všemi účastníky konstatováno, že o podobné akce v oblasti automatické spektrometrie bude v budoucnosti zájem.

V roce 1992 bude zorganizován seminář na téma : Příprava vzorků a recalibrace optických emisních spektrometrů.

SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE

OS SPEKTROSKOPIE PEVNÉHO STAVU

Dne 12.6. a 28.8.1991 se uskutečnily pracovní schůze skupiny, které připravil a řídil Dr. J. A. Mareš, CSc. Na programu schůzí byly přednášky C. Pédriniho a G. Boulona z Francie, jejichž resumé, jak je autoři připravili, dále uvádíme.

C. Pédrini, Laboratoire Physico-Chimie des Matériaux Luminescents, Université Lyon I, Villeurbanne, France :
Study of new fast and radiation hard scintillators for electromagnetic calorimeter at future colliders at CERN

The electromagnetic calorimeters at future colliders at CERN will be qualitative new types of calorimeters which will need quite new kind of scintillators for high design luminosities. There are three basic conditions for these scintillators :

- 1) fast response (lifetime below 15 ns)
- 2) radiation hard resistance
- 3) high density of materials

The search for these new types of scintillators includes either a preparation of these materials (mainly crystals and glasses) but as well as the studies of their optical and luminescence properties together with energy transfer processes.

Two kinds of materials are synthesized and studied :

- I. Ce³⁺-doped compounds (CeF₃, LaF₃-CeF₃ mixed crystals, YAP:Ce, CaF₂:Ce and Ce-doped fluoride glasses).
- II. BaF₂-type scintillators (ThF₄, LiErF₄, LiYbF₄, ErF₃ etc.).

From Ce-doped scintillators the most advantageous is CeF₃ at present time or the mixed LaF₃-CeF₃ crystals. The emission peak wavelengths are in the near UV (\sim between 310-360 nm) and the lifetimes are ranging between 5-25 ns. The normal and perturbed Ce³⁺ sites are observed in these crystals. BaF₂-type scintillators (PbF₂, CsF etc.) are again fast scintillators (e.g. $\tau \approx 3$ ns

for BaF₂) but their density is rather medium (especially that of BaF₂).

The present status of the research of the new type of scintillators for electromagnetic calorimeter show that the Ce-doped crystals are advantageous that BaF₂ type scintillators.

A. Brenier, C. Madej, C. Pédrini and G. Boulon, Laboratoire Physico-Chimie des Matériaux Luminescents, Université Lyon I, Villeurbanne, France : Excited-state dynamics and energy transfer in doped-substituted garnets

Progress in the study of solid-state laser materials stimulate spectroscopic research especially with crystals of garnet structure. The most often used dopants are transition metal ions like Cr³⁺ for tunable systems and rare-earth ions like Nd³⁺, Tm³⁺, Ho³⁺, Er³⁺ for line spectra lasers. In some hosts such as Gd₃Ga₅O₁₂ (GGG) and Gd₃Sc₂Ga₃O₁₂ (GSGG) Cr³⁺ ions are also excellent sensitizers for rare-earth activators. So, a good deal of research has been directed towards the study of material characteristics essential to lasing which can be altered by changing the material's composition. Our approach has been to substitute Ca²⁺ and Zr⁴⁺ ions for some of the Gd³⁺ and Ga³⁺ ions in GGG to give a mixed garnet structure designated (Cs,Zr)-substituted garnet. Such substitution results in a larger lattice constant and then in a weaker crystal field strength allowing more efficient energy transfer between Cr³⁺ and rare-earth ions.

The main goal of the lecture is to illustrate both the optical properties of excited-states in solids by giving a few examples of the excited-state dynamics of Cr³⁺, Tm³⁺ and Ho³⁺ ions in (Ca,Zr)-substituted garnets and, also, the energy transfer mechanisms between these ions. In addition, we give recent results with some other transition metal ions such as Mn⁴⁺, isoelectronic with Cr³⁺, and V⁴⁺, isoelectronic with Ti³⁺, studied by selective Laser-Spectroscopy Techniques. The importance of multisite distribution from nonequivalent centers is emphasized.

OS MAGNETICKÉ REZONANČNÍ SPEKTROSKOPIE

7. seminář NMR - Valtice 1991 se uskutečnil spolu s 9. pracovní schůzí odborné skupiny ve dnech 19. - 21.6.1991 ve Valticích za účasti 38 odborníků, z toho dvou z Rakouska. Na programu schůze, kterou připravil a řídil Dr. Miroslav Holík, CSc, byly informace o mezinárodní konferenci NMR v r.1990, o přípravě mezinárodních konferencí v r. 1992 (Itálie) a v r. 1994 (ČSFR) a také o tuzemských akcích v r. 1992 - 8. seminář NMR - Valtice 1992 a podzimní škola NMR pro pokročilé. Program semináře byl obohacen vý-

stavkou přístrojů firmy Bruker (SRN), Stelar (Itálie) a Tesla - Brno. Dále uvádíme přehled přednesených příspěvků.

V.Mlynárik :

Multikvantová NMR spektroskopie a relativně znamienka interakčních konstant

A.Lyčka, J.Jirman, J.Holeček :

Velikost a relativní znaménko interakčních konstant $J(^{119}\text{Sn}, ^{13}\text{C})$

a $J(^{119}\text{Sn}, \text{H})$ v některých organocínitých sloučeninách

M.Isobajev, G.Sanjukočič, M.Turečková, E.Glazunová :

^{13}C NMR konformační analýza piperidinylových derivátů

M.Holík, Z.Friedl :

Postupná analýza hlavních komponent ^{13}C chemických posunů

D.Střešinková, J.Střešinka, T.Liptaj, F.Halmo :

Identifikácia zložiek organických zmesí z ^{13}C NMR spektier za pomoci počítače

M.Mazúr, V.Mlynárik, T.Liptaj :

Vplyv dimethylformamidu na priebeh hydrolýzy a polykondenzácie TEOSu

P.Novomeský, V.Mlynárik, J.Schöngut :

Štruktúrny rozbor vyššievrúcich ropných frakcií

L.Zalibera, J.Bella, J.Horecký:

Určenie pH erytrocytov pomocou ^{31}P NMR

N.Müller, L.Dibari, G.Bodenhauser :

Unravelling Overlapping Peaks in 2D NMR Spectra

V.Sklenář :

Optimalizace 3D homonukleárních NMR experimentů

J.Straka, B.Schneider, A.Lyčka, J.Jirman :

Aplikace deuterovaných izotopomerů při analýze ^{13}C CP/MAS NMR spekter

M.Hruškovič :

Hardwarová modifikácia pozorovaciej trasy spektrometra NMR-300

S.Sýkora :

Malá firma v NMR a EPR - může to, proboha !, vůbec chodit ?

V.Formáček :

Novinky ve výrobě NMR spektrometrů firmy Bruker

V.Sklenář :

LC NMR - nový krok starým směrem

M.Vich :

Výhody finančního leasingu ve srovnání s investičním úvěrem

L.Půček, P.Kessler, V.Sklenář :

Pulsní sekvence pro isotropaní směšování využívající amplitudově modulovaných RF pulsů

P.Kessler, L.Půček, V.Sklenář :

Efektivní simulace NMR experimentů s přenosem koherence

T.Liptaj, D.Uhrín :

BIRD pulzy a ich aplikácia

K.Bartušek, Z.Starčuk, Jr., Z.Starčuk :
NMR mikroskopie - experimentální zkušenosti v ÚPT

Z.Starčuk, Z.Starčuk, Jr., K.Bartušek :
Nové typy amplitudově modulovaných pulsů

Z.Starčuk, Jr. :

Využití gradientů základního pole ve spektroskopii NMR

I.Krejčí :

Problematika rychlého A/D převodu v akvizičních systémech NMR spektrometrů

M.Kasal, Hrubý, Húsek :

Rychlé přepínání úrovně excitačního signálu v NMR spektroskopii

OS VIBRAČNÍ SPEKTROSKOPIE

Seminář o infračervené spektroskopii v chemii polymerů

VÚKI, Bratislava 1990

Ing.M.Drobný, Dr.B.Strauch

Pracovní seminář "IČ spektroskopie v chemii polymerů", který se konal 3.10.1990 ve Výzkumném ústavu káblov a izolantů v Bratislavě, navazoval na obdobnou akci, pořádanou r. 1989 ve Svitě. Hlavním organizátorem setkání, jehož se zúčastnilo přes 40 zájemců o vibrační spektroskopii z 22 pracovišť ČSFR, byla pobočka ČSVTS při VÚKI v čele s Ing.Viliamem Danišem.

V úvodní přednášce B.Strauch (PřF UK, Praha) hovořil o vývoji FTIR-spektroskopie, jejích principech a výhodách ve srovnání s dispersní spektroskopií. V.Daniš (VÚKI, Bratislava) ve své přednášce pojednal o nestandardních metodách v FTIR-spektroskopii jako jsou reflexní měření (difusní-DRIFT, zrcadlová-spekulární, s vícenásobným zeslabeným odrazem-ATR, FMIR, horizontální válcová cela), fotoakustická metoda (PAS), mikroanalytické postupy vč. IČ-mikroskopu, IČ-emisní analýza, modul pro FT Ramanova spektra v blízké IČ-oblasti, spojení FTIR-spektrometru s chromatografickými metodami (GC, GPC, LC, TLC), s hmotnostními spektry a TGA (termickou analýzou), měření spekter plynů v dlouhocestných kyvetách (až do 40 m).

Aplikace uvedených technik a postupů spolu s dobrým programovým vybavením umožňuje měřit spektra vodných roztoků, potravinářských výrobků, vysokoplňných materiálů (kompozitů, přírodních materiálů na bázi celulozy apod.), biologických materiálů, stopová množství nečistot na površích, strukturální poruchy v polymérech, při analýze ovzduší a monitorování vzdálenějších vrstev atmosféry, dálkovém sledování reakcí v chemických a jiných provozech pomocí optovodičových systémů, v kriminalistice a restaurátorství např. pomocí různých mikrometod, fotoakustické detekce apod. při identifikaci neznámých skvrn a prachových částic.

Ing.P.Vaněk (VÚGPT, Zlín) ve velmi zdařilé přednášce o automatické interpretaci IČ spekter názorně upozornil na přednosti i rizika automatické interpretace, informoval zasvěceně o programových vybaveních zv. SEARCH a o knihovnách IČ spekter včetně

cen a poplatků za užívání databank. Zlínské pracoviště má v oblasti počítačové identifikace vibračních spekter značné zkušenosti.

Referáty v druhé části semináře se věnovaly konkrétním problematikám v IČ spektroskopii. Valdauf a Procházka (Benzina, VÚPM Praha) se zabývali IČ- kvantitativní analýzou maziv; Vnenčáková, Ďurčová a Diačiková (VÚCHV, Svit) stanovením organických pigmentů v PP; Reya a Paulíny (VÚKI, Bratislava) analyzovali pyrolýzní produkty FTIR metodou; Jakoubková a Pola (ÚTZCHT, ČSAV Praha) studovali IČ spektra produktů laserové pyrolýzy silacyklobutanu, Drobný (VÚKI, Bratislava) s J.M.Lisým (CHTF SVŠT, Bratislava) pojednali o reprodukovatelnosti IČ měření při kvantitativní analýze.

Po dobrém společném obědě zdařilá exkurze v laboratořích analytické chemie a ekologie VÚKI umožnila účastníkům setkání seznámit se s tamními technikami FTIR a UV-VIS spektroskopie, chromatografie (GC, GPC, TLC, HPLC), termickou analýzou a elektrochemickými metodami. Výklad ochotných pracovníků laboratoří byl zasvěcený. Organizátoři semináře (Daniš, Drobný) vypracovali podrobný seznam adres účastníků semináře včetně přístrojového vybavení a pracovního zaměření jejich pracoviště.

Kladné hodnocení setkání vyznělo v přání opětového setkání na uvedené téma na podzim 1991.

SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

OS INSTRUMENTÁLNÍCH RADIOANALYTICKÝCH METOD

Konference o instrumentální aktivační analýze IAA 91

Ing. Ivan Obrusník

Konference o instrumentální aktivační analýze IAA 91 se konala ve dnech 3. až 7. června 1991 v Klučenicích. Byla uspořádána Odbornou skupinou instrumentálních radioanalytických metod Čs. spektroskopické společnosti společně s Odbornou skupinou jaderné chemie Čs. společnosti chemické při ČSAV. Konference se zúčastnilo více než 40 odborníků z celé ČSFR zabývajících se vývojem a aplikacemi radioanalytických metod. Přítomen byl i jeden zahraniční účastník.

Během odborného programu konference bylo předneseno celkem 33 referátů, z toho 5 bylo předneseno v rámci firemního dne. Úvodem vzpomenu M. Vobecký 20 let činnosti odborné skupiny instrumentálních radioanalytických metod. Právě konference IAA byly vždy významnými body činnosti této skupiny. V. Hnatowicz se zabýval současnými trendy v instrumentální ultrastopové analýze. Ostatní referáty lze rozdělit do několika tematických okruhů.

První skupina příspěvků byla věnována neutronové aktivační analýze (NAA) s použitím jaderného reaktoru. Metoda NAA byla aplikována při analýze vzorků biologického původu (J. Kučera, J. Kvičala /2 příspěvky/ a D. Tluchoř), analýze historických předmětů (V. Jiránek), sledování vyluhování popílků (C. Kocman) i analýze křemenného skla pro výrobu ampulí používaných v NAA (J. Faltejsek). Několik příspěvků bylo věnováno i metodice NAA - metodě standardizace s použitím k_0 faktorů (I. Obrusník), NAA s různými způsoby gamaspektrometrického měření (J. Kučera), využití aktivační epitermálními neutrony a měření studným detektorem (I. Obrusník). O možnostech využití nového mikrotrouby v ÚNS Kutná Hora pro gama aktivační analýzu pohovořil Z. Řanda.

Další skupina příspěvků se zabývala analytickými technikami, které využívají detekce Roentgenova záření. J. Frána se zabýval analýzou raně středověkých bronzových kování roentgenfluorescenční metodou (RFA), v dalším příspěvku pohovořil o novém programu pro RFA pro osobní počítače. Několik příspěvků se

týkalo analytických metod, které využívají nabitě částice z elektrostatičké urychlovače. Sledováním složení vody z ropných vrtů metodami PIXE a RFA se zabýval J.Kvítek, stanovením kyslíku v povrchových vrstvách pružným rozptylem protonů a částic alfa V.Hnatowicz.

Další tematický okruh byl zaměřen na detekci záření a nové programové vybavení. J.Frána ukázal (a prakticky předvedl přímo na počítači) nový program pro vyhodnocování spekter gama pomocí osobního počítače (program SPDEMOS), který lze získat v ÚJF ČSAV, Z.Kosina seznámil účastníky s programem SAMPO 90, dodávaným firmou Canberra. S.Pospíšil pohovořil o malém detektoru pomalých neutronů a L.Kolář o spektrometrickém systému celotělového počítače. S posledními typy polovodičových detektorů pro detekci nízkenergetického gama a Roentgenova záření, vyvinutými v ÚJV Řež, seznámil účastníky M.Vidra, o novém leteckém spektrometru pohovořil J.Mašek. V.Kapišovský podal přehled sběrnicových systémů pro analyzátorovou techniku.

Další příspěvky se týkaly měření přirozené radioaktivity severočeských uhlí (Z.Formánek) a sledování radiocesiumu v nejdělných houbách (M.Vobecký). Dva referáty (J.Mayer a M.Vaniček) se zabývaly využitím metody radioaktivních indikátorů v hutnictví. Zahraniční účastník Ben Mousa (Libye) seznámil přítomné s pracovištěm instrumentálních radioanalytických metod v Tajura Nuclear Centre v Tripolisu.

Novinkou IAA 91 byla účast několika firem vyrábějících přístroje a detektory pro radioanalytické metody. K těmto firmám patřily Canberra-Packard, Silena a Tesla VÚPJI Přemýšlení. Prakticky předvedly některé nové výrobky a zároveň seznámily účastníky i s některými obecnějšími problémy jak měření nízkých aktivit (J.Verplancke-Canberra), tak měření za vysokých četností impulsů (A.Brugnetini-Silena) či měření při mikroanalýze s využitím Roentgenova záření (Z.Polívka-Tesla). Po celou dobu konference byl k dispozici jeden počítač PC (zapůjčený ÚJF ČSAV), a tak bylo možné předvádět prakticky programy, které byly prezentovány v přednáškách konference.

Poslední den konference byl věnován diskusi účastníků o dalším programu OS instrumentálních radioanalytických metod i o současném stavu rozvoje pracovišť, která se těmito metodami zabývají. Ukazuje se, že i v této oblasti se projevují tendence směřující k omezení počtu pracovišť, přestože řada pracovišť se zabývá praktickými aplikacemi užitečnými jak pro rozvoj technologie a výroby, tak pro sledování znečišťování životního prostředí. Bude nutné hledat i jiné způsoby financování výzkumných i aplikačních prací než doposud, a tak snižovat rozsah omezení na minimum. Účastníci vyjádřili určité obavy z toho, aby jediný reaktor v ČSFR, vhodný pro NAA, nesloužil přednostně uživatelům z ciziny, kteří mohou platit vyšší ceny, ale aby měl vždy určitou kapacitu pro uživatele z ČSFR za pro ně dostupné ceny. Zástupce ČSKAE (V.Ducháček) slíbil, že ČSKAE se bude snažit tuzemské uživatele určitou formou podpořit. Další, i když omezené, možnosti ozařování se nabízejí na mikrotronu v Kutné Hoře (pro gama aktivizační analýzu) a není vyloučena ani možnost ozařování na reaktoru v Polsku. Snaha o omezení nákladů na vědu a výzkum se může projevit v blízké budoucnosti i na možnosti ozařovat na urychlovačích (pro metody PIXE a RBS).

Organizace konference byla tradičně na velmi dobré úrovni, účastníci měli dostatek času jak na diskuse k jednotlivým referátům, tak i na vzájemné diskuse a sdělování informací ve večerních hodinách mimo oficiální program konference. Úroveň většiny přednesených referátů byla velmi dobrá. Každý dostal sborník abstrakt přednesených referátů. Ke zdu konference přispělo i příjemné prostředí střediska ZRUP v Klučenicích. Ukazuje se, že vývoj i aplikace instrumentálních radioanalytických metod u nás jdou stále dále a že si tyto metody stále udržují dobrou pozici mezi ostatními analytickými metodami. Příští rok se konference IAA 92 bude konat opět v Klučenicích. Uvažuje se o pozvání několika zahraničních účastníků i o opětovném pozvání firem produkujících přístroje pro spektrometrii záření a pro radioanalytické metody.

Seminář o mezinárodních konferencích

Dne 14.11.1991 se konal krátký seminář OS instrumentálních radioanalytických metod věnovaný informacím o mezinárodních konferencích z oboru OS v roce 1991 a o pobýtech na významných zahraničních vědeckých ústavech. Semináře, konaného v klubu Ústavu nukleární biologie a radiochemie ČSAV v Krči, se zúčastnilo celkem 25 členů OS.

V.Hnatowicz (Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež) ve své přednášce informoval o letošní European Conference on Accelerators in Applied Research and Technology (ECCART 91), konané v září 1991 ve Frankfurtu n/M které se zúčastnilo více než 300 odborníků z 29 zemí. Byl na ní podán přehled o technickém vývoji a aplikacích různých typů urychlovačů nabitých částic. Plenární přednášky a postery zahrnují kromě technických otázek (konstrukce urychlovačů, iontových zdrojů atp.) zejména analytické aplikace nabitých částic a synchrotronového záření, využití urychlovačů v technologických procesech, při výrobě radioisotopů a speciální možnosti využití urychlovačů v jaderné energetice.

Druhá část přednášky se týkala jednoměsíční stáže v Hahn-Meitner Institutu (HMI-Berlín), kde se V.Hnatowicz zúčastnil experimentů, jejichž cílem je výzkum vlastností a strukturních změn pevných látek modifikovaných bombardováním těžkými ionty s energiemi 10^2 - 10^4 keV. Výzkum se provádí nukleárními analytickými metodami na svazcích nabitých částic neutronů v HMI a ÚJF ČSAV. V HMI je v současné době k dispozici urychlovačový komplex VIKSI pro těžké ionty a jaderný reaktor BER-II, který má být spuštěn počátkem roku 1992. Hlavní směry výzkumu v HMI jsou v oblasti studia pevných látek a v experimentální jaderné fyzice.

Další dvě přednášky se týkaly 8.konference "Modern Trends in Activation Analysis" - MTAA 8, konané v září 1991 ve Vídni za účasti 250 odborníků z více než 40 zemí. Na MTAA 8 bylo prezentováno celkem 261 příspěvků, z toho téměř polovina ve formě přednášek. Jednotlivá zasedání konference tvořily následující tématické okruhy: Metody aktivizační analýzy (AA) a jejich použití ve výzkumu aerosolů, techniky s využitím svazků částic, aplikace AA v průmyslu a v životním prostředí, AA materiálů ze speciálních technologií (high-tech), alternativní metody a je-

jich srovnání s AA, použití AA v různých oblastech, standardizace neutronové aktivační analýzy (NAA) s k_0 faktory, aplikace AA v biologii a lékařství a konečně teorie a programy pro AA.

I. Obrusník (Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež) shrnul nejdůležitější informace z MTAA 8, týkající se nedestrukčních postupů. Zaujaly zejména příspěvky o zařízeních pro NAA u plánovaného reaktoru (Advanced Neutron Source) v USA s parametry 300 MW výkonu, maximálním tokem tepelných neutronů 10^{16} neutronů/cm².s a řadou zařízení (pneumatické pošty) pro provádění INAA, dále srovnání AA s ostatními metodami pro stanovení pouze malého počtu atomů, a využití NAA při analýze aerosolů i vulkanických plynů.

Zajímavosti o instrumentálním vybavení se týkaly použití velkých Ge detektorů, velkých studnových detektorů a anti-Comptonovských systémů v gamaspektrometrii a dále např. promptní aktivační analýzy s využitím svazku chladných neutronů - tento způsob umožňuje dosažení velmi nízkých mezí detekce. Z metodických prací lze zdůraznit především fakt, že modernímu, dlouho prosazovanému způsobu standardizace NAA metodou k_0 faktorů byla tentokrát věnována celá sekce, na které se objevily i některé možnosti zjednodušení standardizace v NAA. Na konferenci byly prezentovány i některé novinky v programovém vybavení jak pro gamaspektrometrii, tak pro NAA. Další příspěvky se zabývaly aplikacemi INAA v různých oborech (archeologie, životní prostředí, geologie, technologie vysoce čistých materiálů atd.).

J. Kučera (Ústav jaderného výzkumu, Řež) se zabýval novinami v oblasti destrukčních postupů v NAA, prezentovanými na MTAA 8. Z radiochemických postupů (RNAA) se objevily nové způsoby stanovení výtěžku separace s využitím nejen izotopických, ale i neizotopických stopovačů (princip radioreagenčních metod) a on-line stanovení výtěžku UV spektrometrií po separacích HPLC nebo ionexovou chromatografií. Byly vypracovány nové postupy RNAA pro stanovení stopových až ultrastopových koncentrací biologicky významných prvků (skupinové separace pro Cl, Br, I, As, Cd, Cu, Mo, Sb, Mn, Sr, Zn, Hg a Se, Co a Ni, jednotlivé separace zejména pro prvky Cd, Co, Cu a Pt). Při analýze vysoce čistých kovů a speciálních materiálů se RNAA uplatnila pro stanovení P jednotlivou separací a až 20 prvků po skupinových separacích. Několik prací se zabývalo i předaktivačními separacemi, zvláště pro analýzu vod, pro stanovení I v půdách a pro stanovení Pt-kovů a Au v geologických vzorcích.

I přes pokračující vývoj INAA (lepší detekční systémy atd.) je zřejmé, že RNAA se uplatní zejména pro stanovení vybraných prvků v různých maticích ve stopových až ultrastopových koncentracích, pro certifikační analýzy RM a všude tam, kde nedestrukční postupy nedostačují a jiné metody stopové analýzy jsou zatíženy rizikem kontaminace při rozkladech vzorků a separaci analytů. V nově vznikajícím oboru - in vitro cytotoxikologii - by studium toxicity prvků a jejich sloučenin na buněčných kulturách a jejich speciace v buněčných a subbuněčných komponentách kombinací RNAA a radiostopovačů s vysokou měrnou aktivitou mělo nahradit experimenty na zvířatech v duchu zásady 3 R (reduction, refinement, replacement), prosazované ochránci zvířat.

OS MÖSSBAUEROVY SPEKTROSKOPIE

Dne 24.9.1991 se na katedře jaderné fyziky a techniky EF STU v Bratislavě uskutečnila pracovní schůze OS Mössbauerovy spektroskopie, kterou řídil vedoucí OS Ing. O. Schneeweiss, CSc. Na programu schůze byly následující informace.

Doc. Petrovič přednesl informaci o experimentálním vybavení laboratoře Mössbauerovy spektroskopie na PF UPJŠ v Košicích, o jejím zařazení do výzkumného programu pracoviště a o projektech, které laboratoř využívají. Pracoviště bylo zařazeno do programu TEMPUS a je v současné době zajištěno i personálně.

Zástupci jednotlivých pracovišť se vzájemně seznámili s výzkumnými programy jednotlivých laboratoří i se způsoby finančního zajištění.

Ing. Schneeweiss přednesl informaci o jednání schůze hlavního výboru Čs. spektroskopické společnosti.

9. čs. spektroskopická konference - v diskusi bylo konstatováno, že 1. cirkulář se nedostal na všechna pracoviště. Vzhledem k finančním těžkostem nelze počítat s tak početnou účastí jako v minulých letech.

Problematika nákupu zářičů pro Mössbauerovu spektroskopii. Bylo konstatováno, že je třeba nalézt způsob umožňující nákup zářičů přímo od výrobce v SSSR. Současné ceny zářičů diskriminují využití Mössbauerovy spektroskopie.

OS RENTGENOVÉ SPEKTROMETRIE

OS rtg spektrometrie uspořádala v Čížkovicích dne 10.10.1991 schůzi na téma "Rtg fluorescenční spektrometr PW 1660 - X'Cem", jíž se účastnilo na 50 zájemců a kterou připravil a řídil vedoucí OS Dr. Václav Macháček.

Na programu byla přednáška pracovníka firmy Philips p. van Eenbergena (Almelo, Holandsko) Popis, výkon a použití přístrojů PW 1660 a X'Cem v průmyslu, především při analýze a kontrole v cementárnách a dále demonstrace přístroje v laboratoři cementárny a vápenky v Čížkovicích (Dr. Macháček, van Eenbergen). Schůze byla zakončena diskusí účastníků.

KOMISE

KOMISE PRO STANDARDY A REFERENČNÍ MATERIÁLY

Seminář "Referenční materiály v chemické analýze" uspořádala komise ve dnech 7.-11.10.1991 v Buřanech. Semináře, jehož se zúčastnili 44 odborníci, čs.výrobci referenčních materiálů, obchodní agentura NADEX a firma BREITLÄNDER GmbH/SRN a který připravil a řídil vedoucí komise Ing.Jan Kučera, CSc, byl zaměřen na problematiku úlohy RM v programech zabezpečení jakosti výsledků analýz, přípravy a certifikace RM v různých analytických oblastech, legislativních aspektů přípravy a využití RM a akreditace analytických laboratoří.

Ze semináře nebyl vydán sborník, ale vzhledem k jeho průřezovému charakteru uvádíme alespoň přehled přednesených příspěvků; zájemcům zprostředkuje kontakt s autorem sekretariát Společnosti.

I. O brusník, ÚJF ČSAV, Řež : Úloha RM při zabezpečení jakosti analytických výsledků a jejich výběr pomocí informační teorie

J. Růžička, J. Badal, FÚNM, Praha : Akreditace laboratoří - předpisy a metodické pokyny

B. Poljak, VZÚ NH, Ostrava : Činnost Komise pro ČSRM - současný stav a perspektivy

K. Bičovský, Analytika s.r.o., Praha : Návrh opatření v oblasti přípravy RM

A. Langrová, GLÚ ČSAV, Praha : Vliv složení standardu na výsledek analýzy

J. Dempír, důchodce, dříve ÚNS, Kutná Hora : Reprezentativní navážka práškových RM

M. Tichý, I. Sperlingová, L. Dabrovská, IHE, Praha : Problematika přípravy RM moče pro stanovení obsahu celkové bílkoviny a kreatinu

M. Kalinčák, Š. Bartha, ÚRVJT, Košice : Problematika přípravy RM půd

T. Paukert, ČGÚ, Praha : Potřebujeme RM pro analýzu vod?

J. Kučera, J. Faltejsek, ÚJV, Řež : Interaktivní program pro vyhodnocování výsledků kruhových analýz pro osobní počítač

J. Faltejsek, L. Kolář, ÚJV, Řež : Program pro testování správnosti výsledků analýz

J. Jagelková, IMUNA, Šarišské Michaľany : Standardní a kontrolní přípravky IMUNA

M. Kalinčák, Š. Bartha, ÚRVJT, Košice : RM pro kontrolu životního prostředí ÚRVJT

B. Švardalová, VZÚ NH, Ostrava : RM VZÚ NH

Z. Čížek, ÚVZÚ Škoda, Plzeň : RM ÚVZÚ Škoda

T. Paukert, ČGÚ, Praha : Nový pohled na atestovaná data v RM pomocí gnostické teorie

R. Breitländer, Hamm, Německo : Činnost firmy Breitländer GmbH v oblasti RM

M. Breda, VÚPS, Praha : Referenční objekty VÚPS pro měření radonu a přirozené radioaktivity

B. Švardalová, VZÚ NH, Ostrava : Nová sada RM rud a aglomerátů

S. Bartha, M. Kalinčák, ÚRVJT, Košice : Certifikace obsahů prvků v RM pšeničné a žitné mouky

J. Kučera, J. Faltejsek, D. Mihalová, P. Mader, D. Kordík, J. Cibulka, ÚJV, Řež, VŠZ, Praha, ČSMÚ, Bratislava : Předběžné výsledky certifikace obsahů prvků v RM hovězích ledvin a svalů

M. Beran, ÚJV, Řež : Porovnání dvou typů rozkladu pro stanovení prvků v biologických materiálech metodou AAS

D. Stárková, SÚKL, Praha : Standardní látky v kontrole léčiv

J. Kučera, ÚJV, Řež : Zkušenosti z kruhových analýz U.S.NIST při přípravě SRM-1515 Apple Leaves a SRM-1547 Peach Leaves

K. Bičovský, ČKD Praha, TL, a.s. : Činnost ČKD Praha, TL v oblasti RM

J. Špička, M. Jančařík, NADEX, Praha : Činnost a služby NADEXu v oblasti RM

D. Mihalová, P. Mader, J. Cibulka, VŠZ, Praha : Systém zabezpečení jakosti výsledků analýz ve stopové laboratoři VŠZ

REFERÁTY

Prof. RICHARD R. ERNST - nositel Nobelovy ceny za chemii

Prof. Zbyněk Ksandr, CSc

Nobelovu cenu za chemii pro letošní rok obdržel Prof. Dr. Richard R. Ernst, profesor fyzikální chemie na Eidgenössische Technische Hochschule v Curychu.

Profesor Ernst je předním odborníkem v oboru nukleární magnetické resonance. V posledních dvou desetiletích se věnoval rozvoji NMR spektroskopie v těch směrech, které našly dnes už nezastupitelné uplatnění jak v chemii, tak i medicíně.

V šedesátých letech navrhl spolu s A. Andersonem (pracovníkem fy. Varian) metodu pulsní NMR spektroskopie, označovanou jako FT-NMR spektroskopie, která překonala a podstatně rozšířila aplikační možnosti klasické metody.

V r. 1975 vyvinul prof. Ernst 2D-NMR spektroskopii, která je důležitou metodou při určování složitých struktur molekul. Jako první použil této metody prof. Wüthrich při určování tří-rozměrných struktur proteinů.

Byl to profesor Ernst, který navrhl a patentoval metodu pořizování tomografických snímků v lékařské diagnostice. Další aplikace NMR tomografie v medicíně jsou ještě ve stadiu základního výzkumu, zatímco FT-NMR spektroskopie je v současné době jedna z nejdůležitějších metod chemického výzkumu i praxe.

Snad jen něco málo z jeho soukromí. Profesor Ernst ve své skromnosti nevěřil, že bude vybrán z řady kandidátů na udělení Nobelovy ceny. Prohlásil, že je řada dobrých vědců a stejně i mnoho zásadních objevů. Sám přiznává, že nemá mnoho času na vlastní rodinu. Jeho hobby je sbírání tibetských chrámových praporů, používaných k meditacím. Tuto zálibu získal při svých cestách do Nepálu.

Jistě si někteří čtenáři připomenou přednášku profesora Ernsta na XX. CSI v r. 1977 v Praze, která byla věnována problematice dvoudimenzionální NMR spektroskopie.

Praktické zkušenosti s akreditací zkušebních laboratoří

Karel Kult, KOLI-servis Praha

Federální úřad pro normalizaci a měření (FÚNM) začal v roce 1991 (jako jediná pověřená organizace v ČSFR) provádět akreditaci zkušeben/laboratoří a posuzovat způsobilost orgánů k provádění výrobkové certifikace. Naše zkušebna KOLI-servis, kterou zřídily Konzervárny a lihovary, s.p. vědeckotechnických a obchodních služeb v Praze, se zabývá analýzami potravin a životního prostředí metodami AAS, HPLC, GC i "klasickými". Již v dubnu 1990 jsme podali přihlášku k prověření za účelem akreditace. Teprve ve 2. pololetí 1990 vydal FÚNM Metodické příručky pro akreditaci (MPA), které v roce 1991 inovoval. V oblasti ekologie jsme první zkušebnou, která má s akreditací zkušenosti od samého začátku. V následujícím přehledu Vás s nimi seznámíme. Po metodické stránce popisujeme akreditační proces v Průmyslu potravin č. 2/1992.

Nutným předpokladem úspěchu v akreditačním procesu je zásada, že akreditační orgán ověřuje plnění akreditačních kritérií, o nichž zkušebna dokládá, že jsou běžně zavedena. Přitom nestačí pouze uplatňovat pravidla dobré laboratorní praxe, ale musí být vyřešena i pravidla pro odměňování personálu, organizační struktura, podřízenost a zastupitelnost pracovníků, vazby na ostatní střediska v organizaci, právní identita apod. Z tohoto důvodu je žádoucí, aby se do akreditačního zapojil i právník, ekonom, metrolog, bezpečnostní a požární technik, a to zvláště v případech, kdy zkušebna využívá při své činnosti dokumentů, vypracovaných pro větší organizační celky, v nichž je zřízena (pracovní, provozní, prémiový, organizační, požární řád apod.).

každý žadatel musí absolvovat složité řízení, které má čtyři fáze :

Fáze přihlašovací

Přihlášku podává subjekt, který zkušební laboratoře zřídil, odboru akreditace FÚNM. Ten posoudí, zda jsou předpoklady k akreditaci, a v příznivém případě dostane zkušebna návody a předpisy (Metodické příručky - MPA), a je jí potvrzena registrace žádosti.

Zkušebna pak vypracuje Příručku jakosti, metrologický řád a další dokumenty přesně v takové formě, jak předpisy vyžadují. Pokud je v organizaci více zkušeben, může být vypracována základní Příručka jakosti, a pro jednotlivé zkušebny pak Příručky dílčí, které na ni navazují.

Konec této etapy zkušebna oznámí FÚNM, a ten vyšle 1-2 pracovníky oddělení akreditace ke kontrole stavu připravenosti.

Fáze prověrky

Vyslaní pracovníci FÚNM zkontrolují Příručku jakosti a metrologický řád a projednají se zkušebnou případné nejasnosti. Tato fáze je bezplatná, a je pomocí v orientaci v předpisech pro akreditaci a jejich přesném dodržování.

Pokud bude shledáno, že zkušebně se nepodařilo nedostatky odstranit ani po dvou konzultacích (zpravidla do 3 měsíců), je její prověřování odloženo, dokud znovu neoznámí, že může pokračovat.

čovat. Tuto fázi jsme úspěšně absolvovali ve 2.čtvrtletí 1991 především díky tomu, že jsme kromě MPA studovali i další dokumenty - normy EN (dnes ČSN EN) 45001 a 45002, ISO/IEC Guide 49, Výnos FÚNM č. 502/1989, Zákon 505/1990 o metrologii a normy řady ISO 9000.

Fáze prověřovací

Oddělení akreditace oznámí zkušebně složení prověřovací komise a termín, kdy je zařazena do plánu prověrek. Prověřovací komise se skládá nejméně z vedoucího inspektora, metrologa a experta pro daný typ zkoušek. Tímto expertem je nejčastěji externí spolupracovník FÚNM. Pokud zkušebna nevnese proti složení komise námitku, uzavře FÚNM s organizací hospodářskou smlouvu na prověřování v částce 24-64 tis. Kčs (podle počtu a náročnosti zkoušek, o jejichž akreditaci se zkušebna uchází). Zkušebna pak předá oddělení akreditace definitivní dokumenty připravené v před-ověře, a zpravidla v dalším čtvrtletí začne prověrka na místě. V našem případě trvala tato fáze měsíc a komise studovala všechny dokumenty a ověřovala, jak jsou plněny, a zda jsou v souladu se zavedenou praxí. Společně s expertem přímo byla přítomná kompletnímu provádění řady zkoušek. Ty vybral expert tak, aby pokryly celé sledované spektrum laboratorních výkonů a byly prověřeny všechny nejnáročnější zkoušky, o jejichž akreditaci jsme se ucházeli. Komise hodnotila velmi důkladně kritéria :

- právní identita
- nestrannost, nezávislost, věrohodnost
- organizace, řízení a pracovníci
- systém zabezpečení jakosti
- systém kontroly
- zkušební a metrologické vybavení
- ověřování a kalibrace
- metody a postupy
- prostory a prostředí
- předmět zkoušky
- záznamy a protokoly
- stížnosti a námitky

Naše zkušebna vyhověla ve všech kritériích a komise konstatovala, že má předpoklady je trvale dodržovat. Celá fáze skončila dílčími a závěrečným protokolem a vyjádřením zkušebny.

Fáze rozhodovací

Oddělení akreditace v této fázi předává všechny materiály technicko-správnímu oddělení odboru akreditace FÚNM k provedení kontroly všech dokumentů. Podle výsledku prověření má vypracovat doporučení řediteli odboru akreditace k rozhodnutí, nebo stanoví doplňující kritéria pro prověřování, pokud shledá, že prověřování nebylo komplexní. Ačkoli v našem případě byly podklady pro toto doporučení jednoznačně kladné a doplňující kritéria stanovena nebyla, ukázala se tato fáze jako nejvíce problematická. Technicko-správní oddělení odboru akreditace a ředitel odboru akreditace se náhle rozhodli, že organizace, v nichž je zkušebna zřízena, nesmějí cokoli vyrábět, ačkoli to MPA i normy připouštějí. V našem podniku existuje jedno výrobní středisko, a přestože jsme při prověřování prokázali, že zkušebna je na něm nezávislá jak organizačně, tak ekonomicky, a

výrobní tohoto střediska se dotýkají jen 3 z 36 zkoušek, o jejichž akreditaci se ucházíme, odmítl nám FÚNM vydat osvědčení o akreditaci, dokud výrobu nezrušíme, nebo se formálně neosamosostatníme. To vyústilo až ve stížnost a osobní jednání s novým předsedou FÚNM Ing.Tošovským v únoru 1992. Toto jednání mělo zásadní význam pro další průběh akreditací laboratoří/zkušeben.

Bude prověřena činnost odboru akreditace revizní komisí FÚNM a na základě revize přijata opatření k odstranění pochybností v důvěryhodnost akreditačních procesů. Urychleně bude ustaven a svolán poradní orgán předsedy FÚNM - odborná komise pro akreditaci, která vytyčí jednoznačné podmínky pro určení ne-strannosti a nezávislosti zkušebny, aby nebyl nadále připuštěn subjektivní výklad. Do tohoto rozhodnutí (a inovace příslušných MPA) nám bylo vydáno Osvědčení o odborné způsobilosti, a po stanovení přesných pravidel nám bude buď změněno na Osvědčení o akreditaci, nebo budou stanoveny podmínky, kterými musíme svou nezávislost zvýšit. Dle současného přístupu FÚNM by totiž akreditaci mohly získat v podstatě jen státní a resortní zkušebny. I organizace výzkumného a vývojového zaměření by sotva mohly prokázat, že jejich zkušebna není závislá na výsledcích výzkumu a vývoje (další typ závislosti), stejně tak jako soukromé zkušební laboratoře, že odměny personálu nezávisí na počtu zkoušek a jejich výsledcích.

Podle současného výkladu pravidel pro akreditaci, který se snaží ředitel odboru akreditace prosadit i ve svém poradním orgánu (technickém výboru), jsou ústně vytyčené požadavky na akreditaci zkušeben/laboratoří v podstatě totožné s požadavky na nezávislost certifikačních orgánů, ačkoli jde o zcela odlišnou instituci, která je popsána jinými normami, a to ČSN EN 45011 a 45012. Pro vysvětlení : Podle subjektivního výkladu pojmu nezávislosti úzkým kruhem pracovníků odboru akreditace je akreditovaná laboratoř (zkušební laboratoř, již byla udělena akreditace) prakticky totéž, co certifikační orgán (orgán řídicí certifikací shody), což není pravda.

Stanovení nové kategorie zkušebny - v našem případě "odborně způsobilá" neodpovídá evropským normám pro akreditaci ČSN EN 45001 a 45002, ani našim československým pravidlům (Metodickým příručkám pro akreditaci, vydaných FÚNM).

V nejbližší době dojde tedy zásahem předsedy FÚNM k zásadním změnám v pravidlech pro akreditaci, o nichž Vás budeme informovat.

33rd IUPAC CONGRESS

(Budapest, 17.-22.8.1991)

Dana Kolihová, VŠCHT Praha

Pravidelné setkání zástupců různých odvětví chemie, konané vždy po dvou letech, probíhalo ve dnech 17.-22.srpna 1991 v Budapešti. Původně plánovaná grandiosní akce s předpokládanou účastí asi 3000 osob se měla konat v areálu Sportovní haly. Nakonec se méně než 800 účastníků sešlo v prostorách L.Éötvös University.

Kongres byl rozdělen do následujících 7 paralelně probíhajících sekcí :

- Sekce I Perspektivy analytické chemie
- II Anorganická a fyzikální chemie
- III Elektrochemie a elektroanalýza
- IV Chemie a biochemie biologicky aktivních organických sloučenin
- V Biotechnologie
- VI Chemie tuků
- VII Chemie polymerů

Společnému zahájení, které v sobotu 17.srpna provedl prof. E.Pungor, byl přítomen i prezident Maďarské republiky pan Árpád Göncz a viceprezident IUPAC prof.A.J.Bard, který měl i úvodní plenární přednášku. Odpoledne již probíhalo jednání v sekcích. Velmi různý počet orálních příspěvků v jednotlivých sekcích pravděpodobně odrážel zájem o zařazené obory a byl i důvodem toho, že sekce VII byla rozdělena na 2 části A a B (80 přednášek), zatímco v sekci III se celkem 9 přednášek vešlo do dvou půldnů.

Sekce I, které jsem se zúčastnila, naplnila přednáškami různého zaměření i různé úrovně všechny dny s výjimkou posledního, ale snad žádný den se nestalo, aby skutečně odezněly všechny avizované přednášky. Mezery v programu bylo však možno vyplnit diskusí nebo prohlídkou výstavy přístrojů v prostorném předšálí stejného podlaží či prohlídkou nabízené odborné literatury několika vydavatelství.

Nejdále do budoucnosti v perspektivách analytické chemie zamířil T.L.Isenhour (Dept.of Chemistry Kansas State University Manhattan, USA) ve své přednášce "Robotics and artificial intelligence in analytical chemistry an inevitable revolution". Jeho "Analytical Director" je počítačem řízený robotizovaný systém s umělou inteligencí pro analytické laboratoře. Měl by provádět běžné analytické postupy, jako je vážení, ředění roztoků, míchání, udržování teploty lázni, měření pH aj. Požadavky na současné roboty jsou mechanická pevnost, odolnost k pracovnímu prostředí a ekonomická únosnost. Jsou závislé na lidském řízení, mají omezené "vidění a hmat". Budoucí robot v kybernetizované laboratoři bude ekonomičtější než člověk, bude mít lepší "zrak a hmat", bude schopný samoregulace a řízení své činnosti. Nebude pro něj problém předávání komponent ke vzorkům, odstřeďování, ředění roztoků, měření pH, nastavení vlnové délky a měření s UV-VIS spektrometrem, srážení a filtrace, plnění kyvet, vymývání, vážení apod. Úkolem člověka bude vytvořit postup, vybrat optimální podmínky pro řešení daného problému a provádět systémovou analýzu. Vývoj bude směřovat k uživatelskému propojení jednotlivých pra-

covišť, vytvoření systému expertů a budování robotizovaných laboratoří zejména pro analýzu vod, pro využití v medicíně, při sledování čistoty životního prostředí apod.

Zajímavá byla i plenární přednáška "Philosophical aspects of analytical chemistry", kterou přednesl prof.H.Malissa (Techn. Univ.Vienna, Institute for Analytical Chemistry), ve které uvedl, že základním axiomem je vždy: "Pravda existuje, ale ... Problém pravdy ve vědě vyžaduje zvláštní přístup, protože cesta, která vychází z předpokladů či z dedukcí se k pravdě pouze asymptoticky blíží".

G.Knapp se svými spoluautory v přednášce "High performance decomposition and enrichment techniques for AAS and ICP-OES" přispěl k problému rozkladu pevných vzorků, který se netýká jenom jím uvedených dvou metod, ale více oborů analytické chemie.

Velké množství přednášek i posterů bylo zaměřeno na analýzu léčiv; některé se zabývaly chemometrickými problémy, jiné perspektivou tohoto oboru či konkrétními aplikacemi. To bylo jistě dáno tím, že významnými sponzory 33.kongresu IUPAC byly CHINOIN Pharmaceutical and Chemical Works Co. LTD a Institute of Drug Research.

Díky několika dalším sponzorům a také díky poměrně vysokému konferenčnímu poplatku (280 US\$) bylo pro všechny účastníky uspořádáno neformální setkání v pátek večer před zahájením konference v aule university a dále oficiální recepce na pozvání maďarské akademie věd v překrásném paláci Etnografického muzea. Přestože jsem byla pozvána jako představitelka Čs.spektroskopické společnosti, neměla jsem žádné výhody zvaných hostů, které jsou u nás při pořádání konferencí běžné, např. účast na výletech či společenském večeru apod. to však nebylo tak podstatné jako událost, která nás tam všechny zaskočila a která se zdála mít možné katastrofální důsledky: puč v sovětském svazu dne 20.8. Dovíдали jsme se zprávy opožděně od maďarských kolegů přes angličtinu, protože v televizi bylo zpravodajství pouze v maďarštině. Naštěstí se vše brzy vyřešilo, takže se účastníci kongresu rozjížděli už klidně do svých domovů, často i velice vzdálených.

Na kongresu byla překvapivě vysoká účast odborníků ze zámoří a ze Skandinávie, pro něž je tato část Evropy, jim dosud omezeně přístupná, velmi zajímavá.

Pokud bych mohla hodnotit celkový dojem z kongresu, pak snad jen tolik, že problematika jednotlivých odvětví chemie se řeší stále více v rámci konkrétních specializací, takže při takto široce pojatém setkání již lidé mezi sebou zjišťují, že odborná diskuse mezi různými obory je většinou jednostranná a že konference zaměřené na jednotlivé oblasti zájmů jsou po odborné stránce nesporně větším přínosem.

V případě zájmu o další podrobnosti, jako např. zapůjčení souhrnu abstraktů přednášek či programu, se můžete obrátit na adresu : Ing.Dana Kolihová, CSc, Ústav analytické chemie VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6.

