



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



BULLETIN

SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
Jana Marca Marci

Spektroskopická společnost
Jana Marca Marci
100 29 PRAHA 6, Thákurova 7

Číslo 72

leden 1994

SEMINÁŘ O ROZKLADU VZORKŮ

Ve dnech 19. - 20.10.1993 se konal v Brně seminář o rozkladu vzorků, který pořádala Spektroskopická společnost JMM ve spolupráci s Vysokou školou veterinární a farmaceutickou v Brně, fakultou veterinární hygieny a ekologie. Tohoto semináře se zúčastnilo více než 100 zájemců z České a Slovenské republiky. Na semináři se představily firmy vyrábějící mikrovlnné pícky na rozklady vzorků, a to C.E.M. (USA), Milestone (I), A.Paar (A) a Prolabo (F). Přednášky byly doplněny praktickými ukázkami rozkladů na představovaných zařízeních, která byla nainstalována v areálu VŠVF. Součástí semináře byla návštěva laboratoře EKOLAB Znojmo (Ing.Vrána), kde byli účastníci seznámeni s programem této laboratoře a s využitím systému Prolabo v návaznosti na stanovení stopových obsahů prvků metodou AAS v různých maticích. V průběhu semináře byla přednesena krátká sdělení některých účastníků, která byla doprovázena bohatou diskusí. Rámec semináře byl však dán zejména přednáškami prof.G.Knappa z Technické university v Grazu "How to avoid systematic errors in sample preparation for trace element analysis - General view of decomposition methods" a "Closed vessel sample decomposition and automatic flow - stream digestion techniques". Seminář se setkal s velmi kladnou odezvou účastníků, kteří se shodli na tom, že seminář obdobného typu by se měl konat častěji.

V. Spěváčková

KOMISE PRO REFERENČNÍ MATERIÁLY A STANDARDY

připravila k vydání publikaci o problematice přípravy a hodnocení referenčních materiálů a podrobněji si všímající použití informační teorie při výběru referenčních materiálů pro zabezpečení jakosti výsledků, přípravy reprezentativního vzorku práškovitých materiálů, použití gnostické teorie neurčitých dat při certifikaci RM a významu standardních látek v kontrole léčiv. Dále jsou diskutovány i praktické problémy z přípravy RM, např. pro stanovení obsahu celkových bílkovin a kreatinu v lidské moči nebo použití RM v laboratorním systému zajištění jakosti analytických dat.

Vzhledem k stávajícím problémům s rentabilitou vydavatelských nákladů bude publikace "Referenční materiály - soubor vybraných přednášek" vydána subskripčně. Zájemci necht se hlásí písemně na adresu sekretariátu Společnosti (166 29 Praha 6, Thákurova 7) nebo telefonicky či faxem (02-311 2343) do 10.3.1994. Podle stávajícího odhadu předpokládaného zájmu by cena publikace neměla překročit 80 Kč.

PLÁN ODBORNÝCH AKCÍ NA ROK 1994

Využití spektroskopie v medicíně
(4 dny, listopad, Praha nebo Liblice)

Sekce optické atomové spektroskopie

- a) Kurz AAS pro pokročilé
(5 dnů, červen, Praha)
- b) Konference atomové spektroskopie
(5 dnů, srpen-září, Pardubice)

ve spolupráci s firmou 2 THETA :

- c) seminář "Analýza organických látek v ŽP"
(4 dny, březen, Řeka)
- d) Hutní analytika 94
(5 dnů, duben, Řeka)
- e) Kurz ICP spektrometrie
(2 dny, červen, Soběšovice)

Sekce molekulové spektroskopie

OS vibrační spektroskopie

- a) Kurz měření vibračních spekter
(5 dnů, únor, Praha)
- b) Kurz interpretace vibračních spekter
(5 dnů, únor, Praha)
- c) 2 odborné semináře s přednáškami zahraničních hostů
(v kooperaci se zahraničními firmami)

OS magnetické rezonanční spektroskopie

- a) 44. pracovní schůze - 24. NMR seminář
(3 dny, duben, Valtice)
- b) 45. pracovní schůze - 20. EPR seminář
(3 dny, květen, Pezinská Baba)

Sekce speciálních spektroskopických metod

OS rtg spektrometrie

ve spolupráci s firmou 2 THETA :
Kurz RTG spektrometrie
(3 dny, červen, Soběšovice)

OS hmotnostní spektrometrie

4. škola hmotnostní spektrometrie
(5 dnů, srpen, místo bude upřesněno)

OS instrumentálních radioanalytických metod
pracovní schůze

Komise

Seminář Komise pro spektroskopické metody monitorování ŽP a
Komise pro referenční materiály
(5 dnů, listopad, místo bude upřesněno)

Spektroskopická společnost JMM oznamuje všem smutnou zprávu, že dne 2. prosince 1993 nečekaně v Lipsku zemřel ve věku 55 let

prof. Dr. Klaus D I T T R I C H

Prof. Dittrich, absolvent lipské univerzity (1961), přednášel instrumentální analytickou chemii na této škole a zároveň byl vedoucím analytické sekce Střediska pro výzkum životního prostředí Lipsko-Halle. Jeho užším vědním oborem byla atomová spektroskopie. Prof. Dittrich patřil k hlavním organizátorům aktivity německých spektroskopiků, byl duší řady konferencí "Analytik-Treffen". Pro svoje vynikající schopnosti byl pověřen vedením příštího kongresu Colloquium Spectroscopicum Internationale (CSI) 1995, jehož organizací pro Lipsko získal.

Prof. Dittrich se pravidelně, rád a aktivně účastnil našich odborných akcí, a na druhé straně umožnil řadě našich spektroskopiků výhodné studijní pobyty a často bezplatnou účast na německých konferencích. Patří mu za to náš trvalý dík. Bude nám dlouho chybět jeho dynamická osobnost přístupná vědecké spolupráci, vážné debatě i každé zábavě, jeho pracovní nasazení a optimismus, stále mladistvá tvář pod k nebi trčícím ježčím účesem.

Čest jeho památce !

Předsednictvo Spektroskopické společnosti JMM

Jak se pořádají Kanadské spektroskopické konference

Spektroskopické konference pořádané Kanadskou spektroskopickou společností se konají každoročně. Jejich hostitelem a konkrétním organizátorem je vždy některá z kanadských universit. Konference jsou spojeny s valným shromážděním Společnosti a volbou hlavního výboru a s udílením cen: Ceny Gerharda Herzberga za vynikající výsledky v rozvoji spektroskopie, Barringerovy ceny za významný příspěvek k aplikaci spektroskopie v analytické chemii, průmyslu, medicíně nebo vědě o životním prostředí a Čestného členství v Kanadské spektroskopické společnosti za významný příspěvek k rozvoji Společnosti.

V rámci letošní 39. Konference se přibližně 350 účastníků, domácích i zahraničních (USA, Japonsko, a řada evropských zemí, včetně České republiky) spolu se zástupci 20-ti mezinárodních i kanadských firem shromáždilo v areálu Université Laval v Quebecu (hlavním městě stejnojmenné provincie). Jednání probíhala v sekcích s výjimkou přednášek laureátů Herzbergovy a Barringerovy ceny M. Moskovitse a Terry B. Mc Mahona. V průběhu 3 dnů konferenčního jednání bylo prezentováno 280 příspěvků formou 40-ti minutových zvaných, a 20-ti minutových sekčních přednášek v osmi paralelně probíhajících sekcích. Výčet sekcí včetně počtu sekčních jednání (půldnů) jim věnovaných může sloužit jako určitý průřez tematikou, kterou se kanadští spektroskopici (a jimi pozvaní zahraniční účastci) zabývají:

Chemical Speciation	6
Plasma Spectroscopy	6
Mass Spectrometry	4
2nd Annual Ion Mobility Spectroscopy Workshop	4
Spectroscopy at Interfaces	4
Biological Trace Element Analysis	3
Spectroscopic Investigation of Polymers and Polymer Blends	3
New Developments in Vibrational Spectroscopy	3
Absorption and Fluorescence Spectroscopy	2
Applications of NMR Spectroscopy	2
Graphite Furnace Techniques	2
Recent Advances in Ultratrace Analysis	1
Application of Spectroscopy in Geoscience	1

Pro nás je samozřejmě zajímavé srovnat průběh Kanadské spektroskopické konference s našimi Čs. spektroskopickými konferencemi s mezinárodní účastí a uvést i některé názory kanadských kolegů. Roční frekvenci konání "všespektroskopické" konference pokládají mnozí kanadští spektroskopici za příliš častou. Naše praxe, tj. pořádání spektroskopické konference jednou za 4 roky, kombinované s řadou specializovanějších akcí jednotlivých sekcí naší Společnosti, se Kanadčanům líbila. Mnozí rovněž postrádali na Kanadské spektroskopické konferenci posterové prezentace a diskuse, které umožňují bližší kontakt mezi jednotlivými sekcemi. Iniciátory neformálních diskusí byli většinou PhD studenti, kteří tvořili nejméně třetinu aktivních účastníků konference. Zajímavým "experimentem" bylo začlenění přednášek zástupců firem do odborného programu konference. Výsledky, od výrazně pozitivních po negativní, byly zásadním způsobem ovlivněny schopnostmi a připraveností příslušného zástupce - přednášejícího. Zatímco přednášky spočívající ve výčtu parametrů nabízených přístrojů vědce nezaujaly, přednášky prezentující konkrétní výsledky získané na nových prototypch spektrometrů naopak vyvolaly živé diskuse a doslova přitáhly spektroskopiky k vystavovaným přístrojům. Ukázalo se, že výběr zástupců firem z řad

lidí obeznámených s vědeckou prací a aktivní výzkum prováděný firmami ve spolupráci s universitami a vědeckými pracovišti je obecně "dobrým tipem" pro komerční úspěch spektroskopických firem.

UDĚLENÍ CENY GERHARDA HERZBERGA 1993
profesoru Martinu Moskovitsovi (University of Toronto)

Historie některých objevů je někdy neméně zajímavá než objevy samotné. Tak je tomu i v případě povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface Enhanced Raman Scattering, SERS). Zesílení Ramanova rozptylu adsorbátů efektem povrchu (zkráceně SERS) pro molekuly pyridinu adsorbované na povrchu stříbrné elektrody zdrsňené oxidačně-redukčním cyklem poprvé pozoroval, avšak v podstatě "neobjevil", M. Fleischmann (University of Southampton) v r. 1974 [1]. Teprve o dva roky později R. Van Duyne (Northwestern University, Chicago) zopakoval Fleischmannův experiment, stanovil přibližný počet rozptylujících molekul pyridinu a zjistil, že pozorovaný signál je téměř milionkrát větší než odpovídá signálu klasického Ramanova rozptylu daného počtu molekul pyridinu. K obdobnému výsledku dospěl nezávisle na Van Dyunovi také A. Creighton (University of Canterbury) [3]. Vlastní podstata jevu však zůstávala neobjasněna a stala se motivací horečné badatelské činnosti fyziků i chemiků, teoretiků i experimentátorů. Její výsledky byly shrnuty v známé knize editorů Changa a Furtaka [4]. Přesto však již v roce 1978 (tedy pouze rok po uveřejnění výsledků Van Duyna a Creightona) byla publikována práce M. Moskovitse [5], která jasně a jednoznačně popisuje hlavní podstatu SERSu rezonančním excitacím povrchových plasmonů lokalizovaných na nerovnostech zdrsňených povrchů kovů vhodných dielektrických vlastností, tj. Ag, Au a Cu. Toto překvapivě jednoduché vysvětlení však v době svého zveřejnění nebylo plně doceněno a možná ani důsledně pochopeno. Teprve téměř pětileté úsilí řady výzkumných skupin, dokumentované zhruba 500 publikovanými pracemi [6] prokázalo zásadní správnost Moskovitsova vysvětlení, známého dnes jako "elektromagnetický mechanismus SERSu". Není vyloučeno, že právě díky této komplikované historii objevu a vysvětlení podstaty SERSu jsme se nedočkali udělení Nobelovy ceny za SERS.

Podstatná je však skutečnost, že na základě zesílení Ramanova rozptylu efektem povrchu vznikla nová, vysoce sensitivní a selektivní spektroskopická metoda, spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS-spektroskopie). Za téměř dvacet let své existence nalezla SERS-spektroskopie široké uplatnění v řadě oborů: chemická analýza, studium struktury a reaktivity biologicky významných molekul, studium adsorpce na kovových površích a heterogenní katalýza, sledování průběhu a identifikace produktů elektrodových reakcí atd. Navíc, Ramanův rozptyl zdaleka není jediným povrchem zesíleným optickým procesem: rezonanční excitací povrchového plasmonu dochází na drsných površích Ag, Au, Cu k zesílení v podstatě všech optických (tj. fotony generovaných) procesů, např. absorpce a generace druhé harmonické frekvence. Povrchem zesílená absorpce rovněž generuje povrchem zesílenou (přesněji modifikovanou) emisi a fotochemickou reaktivitu [7]. Jedním z nejperspektivnějších směrů v dalším rozvoji výzkumu SERSu a dalších povrchem zesílených optických procesů je jejich spojení s mikroskopickými technikami pro získání konkrétní obrazové informace o aktivním povrchu a (v poněkud vzdálenější budoucnosti) i o lokalizaci adsorbátu na tomto povrchu. Očekávaným výsledkem jsou experimentální podklady

pro vytvoření realističtějších teoretických modelů pro optimalizaci faktoru zesílení efektem povrchu a v důsledku toho např. další snížení meze SERS-spektroskopické detekce analytů rozšíření možností SERS-spektroskopického studia biomolekul in situ, atd.

Letošní laureát Herzbergovy ceny, profesor M. Moskovits, přispěl k rozvoji SERSové spektroskopie téměř 40-ti původními pracemi a několika soubornými články. Kromě již zmíněného objasnění elektromagnetického mechanismu [5] jmenujme alespoň odvození a experimentální důkaz výběrových pravidel SERSu [8], která umožňují určit orientaci adsorbátu vzhledem k povrchu na základě interpretace SERS-spekter a dále teorii elektromagnetického mechanismu SERSu molekul adsorbovaných na povrch fraktálních stříbrných klastrů [9]. Souborný článek Surface Spectroscopy [7] patří k nejčastěji citovaným pracím SERSové literatury. Přednáška "Superficial Spectroscopy: 20 Years of Hunting Molecules on Surfaces", která v anekdotické formě představila nejdůležitější mezníky ve vývoji SERSové spektroskopie [10], ale především samotný fakt udělení prestižní Herzbergovy ceny Kanadské spektroskopické společnosti M. Moskovitsovi, přinesly radost a uspokojení všem, kteří se "honbou za molekulami na površích" zabývají.

Literatura :

1. Fleischmann, M., Hendra, P.J., Mc Quilann, A.J. : Chem. Phys. Lett. 1974, 26, 163.
2. Jeanmaire, D.L., Van Duyne, R.P. : Electroanal. Chem. 1977, 84, 1.
3. Albrecht, M.G., Creighton, J.A. : Am. Chem. Soc. 1977, 99, 5215.
4. Surface Enhanced Raman Scattering; Chang, R.K., Furtak, T.E., Eds.; Plenum Press: New York, 1982.
5. Moskovits, M.J. : Chem. Phys. 1978, 69, 4159.
6. Seki, H.J. : J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 1986, 39, 289.
7. Moskovits, M.J. : Rev. Mod. Phys. 1985, 57, 783.
8. Moskovits, M.J., Suh J.S. : J. Phys. Chem. 1984, 88, 5526.
9. Stockman, M.I., Shalev, V.M., Moskovits, M.J., Botet, R., George, T.F. : Phys. Rev. B, 1992, 46, 2821.
10. Moskovits, M.J. in Proc. 39th Canadian Spectroscopy Conference 110.

B. Vlčková

OZNÁMENÍ O KONÁNÍ POKRAČOVACÍHO KURZU AAS

Ve dnech 8. - 10.6.1994 se bude konat na VŠCHT v Praze pokračovací kurz AAS. Odborný program bude sestávat z následujících okruhů přednášek : nové koncepce a pokroky v AAS, rozklady vzorků pro účely AAS, separační metody používané v AAS, rušivé vlivy při generování hydridů, problémy ultrastopových analýz, správná laboratorní praxe, používání referenčních materiálů a příprava laboratoří pro akreditaci.

Účastnický poplatek, který zahrnuje organizační náklady, souhrn sylabů přednášek a další konferenční materiály, činí 900 Kč pro kolektivní členy Společnosti a 1200 Kč pro ostatní účastníky.

Ubytování a stravování si účastníci kurzu zajišťují sami (omezená možnost ubytování bude ve studentských koležích, patřících Správě účelových zařízení VŠCHT Praha).

Zájemci o kurz se mohou přihlásit buď písemně na adresu Společnosti nebo telefonicky (k dispozici záznamník) či faxem na č. 02 - 3112343. Přihlášky zašlete nejpozději do 15.4.1994

Spektroskopická společnost JMM a VŠCHT Pardubice pořádají
7. konferenci atomové spektroskopie

ATOMOVÁ SPEKTROSKOPIE V CHEMICKÉ ANALÝZE

Konference se bude konat ve dnech 30. srpna až 2. září 1994 v kongresovém centru VŠCHT Pardubice a bude pokrývat všechny obory optické a hmotnostní spektroskopie pro chemickou analýzu. Jednotlivé sekce budou věnovány pokrokům v metodice i v přístrojové technice, analytickým aplikacím, referenčním materiálům, zpracování dat a systémům měření ke kontrole a zajištění kvality analýz pro akreditované laboratoře. Během konference bude v kongresovém centru probíhat výstava přístrojů.

Jednací jazyk je přednostně angličtina, přednášet lze i česky nebo slovensky, abstrakt však nutno dodat v angličtině. Postery jsou přípustné jen v angličtině.

Ubytování účastníků bude zajištěno v koležích (cca 60 Kč/noc) nebo v hotelu Garni+++ Synthesia (cca 110 Kč/noc) vzdáleném asi 100 m od konferenčního centra. Strava i občerstvení budou v konferenčním centru k dispozici.

Účastníci obdrží soubor abstrakt na začátku konference. Termín k odeslání abstrakt (maximálně 2 stránky k přímé reprodukci) je 30. červen 1994. Konferenční poplatek 900 Kč pro kolektivní členy Společnosti (1200 Kč pro ostatní) nutno uhradit po obdržení složenky do 30.6., po tomto termínu bude o třetinu zvýšen.

Termíny : 2 cirkulář se závaznými přihláškami 30. březen
zaslání abstraktu 30. červen
zaplacení sníženého konf. poplatku 30. červen

Zájemci o účast na konferenci necht se písemně na adresu sekretariátu Společnosti nebo telefonicky (k dispozici záznamník) či faxem na č. 02-3112343 s uvedením názvu případné přednášky nebo posteru.

Žádáme členy Společnosti, aby členské příspěvky uhradili
do 15. dubna 1994

Spektroskopická společnost Jana Marci Marci
adresa sekretariátu : 166 29 Praha 6, Thákurova 7
Redakční rada : RNDr. M. Fara, CSc, Doc. M. Gricová, CSc,
RNDr. K. Jurek, CSc, RNDr. J. Sysalová, CSc, RNDr. B. Vlčková, CSc
Technická redakce : P. Vampolová. Redakční uzávěrka : leden 1994
Pouze pro vnitřní potřebu.
Uzávěrka příštího čísla Bulletinu : březen 1994

Podávání novinových zásilek povoleno Ředitelstvím pošt Praha
čj. NP 2495/1993 ze dne 3.1.1994