



Spektroskopická společnost
Jana Marca Marci 358
166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



BULLETIN

SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
Jana Marca Marci

Číslo 74

červen 1994

KURZ AAS pro pokročilé
Ing. Věra Spěváčková, CSc

Ve dnech 8.-10.6.1994 uspořádala Spektroskopická společnost Jana Marca Marci kurz atomové absorpční spektroskopie pro pokročilé, kterého se zúčastnilo 62 frekventantů. Program kurzu vznikl na základě požadavků účastníků předcházejících základních kurzů AAS a týkal se zejména problémů, které zajímaly široký okruh uživatelů metod AAS.

Program kurzu byl rozdělen do tématických bloků :

1. den dopoledne se konala přednáška dr. Dědiny "Rušivé vlivy při generování hydridů a možnosti jejich zvládnutí". Odpoledne bylo věnováno přednášce ing. Kučery "Správná laboratorní praxe a použití referenčních materiálů v analytické chemii", přednášce dr. Fary o přípravě laboratorní pro akreditaci, a dále byly zařazeny přednášky ing. Kolihové "Korekce neselektivní absorpce", ing. Černoorského "Pokroky v komerční instrumentaci" a společná přednáška dr. Sysalové a dr. Musila "Specifické problémy stopové a ultrastopové analýzy".

2. den začal odpoledne blokem přednášek o problémech, spojených s rozklady vzorků : rozklady anorganických vzorků se zabýval dr. Šulcek, o rozkladech vzorků kompostů hovořil ing. Kalaš, o vzorcích rostlinného materiálu přednášel dr. Mader a rozklady vzorků živočišného materiálu byly náplní přednášky dr. Pavelky. Odpolední blok přednášek se pak týkal separačních metod, užívaných pro účely AAS. O separacích a předkoncentracích pomocí sorbentů přednášel dr. Slovák, o separacích a předkoncentracích v plynné fázi hovořil ing. Černoorský a použití metody extrakce bylo náplní přednášky ing. Spěváčkové. Závěr patřil dr. Kubáňovi a jeho přednášce o použití Flow Injection Analysis v atomové spektroskopii a diskusi účastníků s přednášejícími.

3. den byl věnován souhrnné přednášce prof. Plška na téma "Základné aspekty dalšího vývoja prístrojovej techniky pre prvkovú spektrálnu analýzu".

Kurz byl doprovázen diskusemi jak po jednotlivých přednáškách, tak i na závěr. Tyto diskuse se týkaly problémů, které zajímaly všechny účastníky a kde si účastníci vyměňovali vlastní zkušenosti.

Účastníci kurzu byli vybaveni sylabem přednášek a po ukončení kurzu a diskusi obdrželi osvědčení o absolutoriu.

Po uzavření soutěže mladých spektroskopiků proběhlo posuzovací řízení, v němž ke každé práci byly vypracovány dva posudky od odborníků v předmětném oboru spektroskopie. Školská komise, která posuzovací řízení zorganizovala, shrnula posudky a projednala návrh pořadí pro hodnocení prací. Jednání komise ve složení Doc.L. Čermáková, Doc.V. Fidler a Dr.V. Hanuš se uskutečnilo 14.6.1994.

Návrh komise na pořadí soutěžících byl předložen zasedání Hlavního výboru Společnosti dne 22.6.1994, který po vyslechnutí závěrů z posudků a návrhu školské komise rozhodl o udělení cen následovně :

Cenu 3000,- Kč obdrží soutěžící :

Mgr. František **Trojánek** (PGDS na MFF UK) za předložené práce

"Photodarkening effect on absorption nonlinearity in CdS_xSe_{1-x}-doped glass", "Luminescence and nonlinear optical properties of porous silicon", "Transmission study of picosecond photocarrier dynamics in free-standing porous silicon".

Ing. Vladimír **Havlíček** (PGS VŠCHT Praha) za práci "Sequencing of cyclosporins by fast atom bombardment and linked-scan mass spectrometry".

Cenu 2000,- Kč obdrží soutěžící :

Mgr. Michaela **Knížová** (PGDS MFF UK) za práce "In situ XPS studies of the deposition of thin films from tetrakis(dimethylamido)titanium organometallic precursor for diffusion barriers", "Study of tetrakis(dimethylamido)titanium decomposition on Si(100) by X-ray photoelectron spectroscopy"

Evžen **Amler**, PhD za práci "Structural dynamics and oligomeric interactions of Na⁺, K⁺ - ATPase as monitored using fluorescence energy transfer"

Cenu 500,- Kč obdrží

Ing. Lubomír **Umanec** za práce "Stanovení Ce, La, Nd a Pr ve vzorcích se železnou maticí OES-ICP spektrometrií", "Stanovení prvků vzácných zemin Y a Sc v roztocích s Al, Fe a U maticí".

Komise se dále rozhodla seznámit posledního soutěžícího s došlými posudky, neboť nižší ocenění v soutěži bylo vyvoláno pouze odlišnou úrovní prezentace jinak velmi významné experimentální práce.

Anotace soutěžních prací uvedeme v některém z příštích čísel Bulletinu.

Vznik odborné skupiny Magnetické rezonanční spektroskopie

Událostí, důležitou pro vznik odborné skupiny MRS, byla 5. československá spektroskopická konference v Havířově v roce 1974. Tehdy se sešli zájemci o vznik této skupiny s předsednictvem hlavního výboru Čs. spektroskopické společnosti a dohodli ustavení přípravné komise, jejímiž členy byli Doc. Ksandr, Dr. Ulbert, Dr. Vacek, Ing. Starčuk, Dr. Vida, Doc. Kováč, Dr. Holík, Doc. Komenda a Ing. Palovčík. Přípravná komise rozeslala zainteresovaným pracovištím dotazník, aby získala přehled o členské základně skupiny MRS. Ustavující schůze skupiny se uskutečnila v Brně dne 20.6.1974 za účasti 36 členů. Prvními zvolenými funkcionáři OS MRS se stali Doc. Jaro Komenda, CSc z UJEP Brno (předseda), Dr. Miroslav Holík, CSc z VUČCh Lachema Brno (místopředseda) a členy výboru byli Ing. Starčuk (ÚPT Brno), Doc. Ksandr (VŠCHT Praha), Ing. Trška (VŠCHT Praha), Dr. Pilař (ÚMCH ČSAV Praha), Dr. Vacek (ÚJV Řež), Ing. Palovčík (CHTF SVŠT Bratislava), Ing. Szöcz (ÚP SAV Bratislava) a Ing. Staško (CHTF SVŠT Bratislava). Počet přihlášených členů OS se záhy rozrostl na přibližně 120 a mezi tímto číslem a 150 se pohybuje dosud.

Akce z oblasti magnetické resonance před vznikem OS

První obsáhlou informací o NMR spektroskopii sepsal pro časopis Chemie Ing. Otto Knessl z Chemického ústavu ČSAV v roce 1958, ale již v roce 1956 vznikla na Ústavě přístrojové techniky ČSAV v Brně skupina vysokofrekvenční spektroskopie pod vedením Ing. J. Dadoka, CSc., která v roce 1959 vyvinula první československý NMR spektrometr s pracovní frekvencí 30 MHz. O rok později vznikl NMR spektrometr s pracovním kmitočtem 40 MHz, za který získal kolektiv ÚPT cenu za vědeckou práci. V roce 1964 byl touto skupinou vyvinut H-1 NMR spektrometr s frekvencí 60 MHz a v Tesle Brno bylo vytvořeno konstrukční oddělení, které mělo tento přístroj zavést do výroby. To se podařilo a v roce 1965 byl první NMR spektrometr pod typovým označením BS 477 představen na Brněnském mezinárodním veletrhu. Ve spolupráci s ÚPT ČSAV byl tento typ postupně zdokonalován a v roce 1967 byl přeměněn na typ BS 478, který byl již vybaven jadernou stabilizací, automatickou korekcí Y a teplotní sondou. V té době pracovaly již na ÚMCH ČSAV v Praze a v Ústavu organických syntéz v Pardubicích spektrometry firmy JEOL a na ÚOCHB ČSAV přístroj firmy Varian, takže nastal čas, podělit se o zkušenosti s kolegy a seznámit další zájemce s výsledky prvních studií v této oblasti. Proto byly pro relativně široký okruh zainteresovaných osob uspořádány tyto akce :

- 10.-12.5.1967 Mezinárodní seminář o metodách NMR spektroskopie
Pořadatel : ÚOCHB ČSAV - Dr. Samek
Přednášející : od firmy Varian a z NDR
Místo : ÚMCH ČSAV, Praha-Petřiny
(140 účastníků, z toho 33 z ciziny)

19. -21. 2. 1969 1. Celostátní porada o radiospektroskopii
Pořadatel : VŠT Košice - Prof. Rákoš
Místo : VŠT Košice (76 účastníků)
22. -26. 9. 1969 2. Seminář o aplikacích NMR spektroskopie
v organické chemii
Pořadatel : ÚOCHB ČSAV - Dr. Samek
Místo : ÚMCH ČSAV, Praha-Petřiny
7. -10. 9. 1971 3. Colloquium on Magnetic Resonance
Pořadatel : ÚPT ČSAV - Ing. Starčuk
Místo : PFF UJEP Brno
(program z oblasti NMR a EPR spektroskopie)

V roce 1971 byla zahájena serie OMR seminářů na Katedře fyzikální a teoretické chemie Přírodovědecké fakulty UJEP v Brně pro zájemce z brněnských ústavů, vysokých škol a Tesly. Od 13.1.1971 do 16.5.1974 byly uspořádány 23 semináře; tyto semináře pokračovaly i po ustavení OS až do roku 1981. Celkem bylo uspořádáno 37 seminářů, na nichž přednášeli : Z. Starčuk (7x), M. Holík (7x), V. Sklenář (5x), M. Navrátil (5x), M. Sedláčková-Turečková (3x), J. Komenda (3x), P. Kubáček (2x), L. Mezník, J. Běluša, J. Filipenský, J. Jonas, J. Kypr, V. Vetterl, Z. Vavrouch, I. Borkovcová a E. Repko (1x).

Akce pořádané od vzniku odborné skupiny MRS

1. NMR seminář (20. 6. 1974) - UJEP Brno
1. Symposium o NMR spektroskopii (19. -21. 11. 1974) ÚMCH ČSAV Praha,
hotel Olympic, pořadatel VŠCHT Praha
1. EPR seminář (26. 11. 1974) - ÚFM ČSAV Brno
2. NMR seminář (26. 3. 1975) - ÚFM ČSAV Brno
téma : Využití NMR spektroskopie v kvantitativní analýze
2. EPR seminář (29. -30. 5. 1975) ÚP SAV - Pezinská Baba
3. NMR seminář (19. 6. 1975) - UJEP Brno
téma : Experimentální techniky NMR spektroskopie
4. NMR seminář (19. 11. 1975) - ÚMCH ČSAV Praha
téma : NMR spektroskopie v molekulární chemii
3. EPR seminář (20. -21. 11. 1975) - ÚMCH ČSAV Praha
téma : Nové techniky EPR spektroskopie
5. NMR seminář (12. 5. 1976) - VÚČCH Lachema Brno
téma : NMR spektroskopie pevných látek
4. EPR seminář (3. -5. 11. 1976) ÚP SAV - Pezinská Baba
- Symposium po XX. CSI (4. -9. 9. 1977) - UJEP Brno
téma : Magnetická resonance paramagnetických systémů
6. NMR seminář (28. 3. 1978) - BFÚ ČSAV Brno
téma : NMR spektroskopie nevodíkových jader
5. EPR seminář (31. 5. -2. 6. 1978) ÚP SAV - Pezinská Baba
téma : Pokroky v čs. EPR laboratořích za poslední dva roky
7. NMR seminář (6. 9. 1978) - CHTF SVŠT Bratislava
téma : Aplikace počítačů v NMR spektroskopii
2. symposium o NMR spektroskopii (3. -5. 10. 1978) Chlum u Třeboně,
pořadatel VŠCHT Praha

- Společná pracovní schůze NMR a EPR (26. 4. 1979) - VÚČCH Brno
téma : Panelová diskuse o výuce NMR a EPR na vysokých školách
6. EPR seminář (30. 5. -1. 6. 1979) - ÚP SAV - Pezinská Baba
- Společná pracovní schůze NMR a EPR (15. 11. 1979) - BFÚ ČSAV
téma : Magnetická resonance v biochemii a biologii
8. NMR seminář (6. 5. 1980) - VÚČCH Lachema Brno
téma : NMR spektroskopie v kvantitativní analýze
7. EPR seminář (28. -30. 5. 1980) - ÚP SAV - Pezinská Baba
- Mezinárodní symposium o NMR spektroskopii (29. 9. -3. 10. 1980),
Smolenice, pořadatel CHTF SVŠT Bratislava
9. NMR seminář (13. -15. 5. 1981) - 1. NMR Valtice
téma : Využití počítače v NMR spektroskopii
8. EPR seminář (27. -29. 5. 1981) - ÚP SAV - Pezinská Baba
10. NMR seminář (24. 3. 1982) - VÚČCH Lachema Brno
téma : NMR jiných jader než H-1 a C-13
9. EPR seminář (26. -28. 5. 1982) - ÚP SAV - Pezinská Baba
3. Mezinárodní symposium o NMR spektroskopii (7. -9. 9. 1982), Tábor
pořadatel VŠCHT Praha
10. EPR seminář (25. -27. 5. 1983) - ÚP SAV - Pezinská Baba
11. NMR seminář (8. 10. 6. 1983) - 2. NMR Valtice
téma : Korelace v NMR spektroskopii
12. NMR seminář (14. 3. 1984) - ÚFM ČSAV Brno
téma : Pulsní metody v NMR spektroskopii
11. EPR seminář (květen 1984) - ÚP SAV - Pezinská Baba
- Sekce NMR při 7. Čs. spektroskopické konferenci (17. -22. 6. 1984)
České Budějovice, pořadatel ČsSS
diskusní téma : Temperature Measurements in NMR Spectroscopy
13. NMR seminář (6. 2. 1985) - UJEP Brno
téma : Matematické zpracování NMR výsledků
12. EPR seminář (29. -31. 5. 1985) - ÚP SAV - Pezinská Baba
14. NMR seminář (5. -7. 6. 1985) - 3. NMR Valtice
téma : Relaxační časy v NMR spektroskopii
diskusní téma : České a slovenské názvosloví 2D-NMR
15. NMR seminář (24. 2. 1986) - Tesla Brno
téma : Fyzikální a přístrojové problémy NMR spektroskopie
13. EPR seminář (26. -28. 5. 1986) ÚP SAV - Pezinská Baba
4. Mezinárodní symposium o NMR spektroskopii (16. -20. 6. 1986),
Tábor, Pořadatel VŠCHT Praha, (16. NMR seminář)
14. EPR seminář (27. -29. 5. 1987) ÚP SAV - Pezinská Baba
17. NMR seminář (15. -19. 6. 1987) - 4. NMR Valtice
doprovodný program : Letní škola pulsni NMR spektroskopie
18. NMR seminář (18. 2. 1988) - Tesla Brno
téma : Fyzikální a přístrojové problémy NMR spektroskopie
- Sekce NMR při 8. Čs. spektroskopické konferenci (19. -24. 6. 1988)
České Budějovice, pořadatel ČsSS
téma : Chemometrics in NMR Spectroscopy
15. EPR seminář (21. -25. 11. 1988) v rámci 6. SMEA Symposium on ESR
Spectroscopy in Biochemistry, Molecular Biology and Medicine,
Smolenice

16. EPR seminář (24.-26.5.1989) ÚP SAV - Pezinská Baba
 19. NMR seminář (18.-20.10.1989) - 5. NMR Valtice
 téma : Automatizace v NMR laboratoři
 20. NMR seminář (15.-17.10.1990) - 6. NMR Valtice
 téma : Instrumentální NMR spektroskopie
 17. EPR seminář (29.-31.5.1991) ÚP SAV - Pezinská Baba
 21. NMR seminář (19.-21.6.1991) - 7. NMR Valtice
 téma : NMR a jiné analytické metody
 22. NMR seminář (22.-24.4.1992) - 8. NMR Valtice
 18. EPR seminář (27.-29.5.1992) - KFCH STU - Pezinská Baba
 23. NMR seminář (14.-16.4.1993) - 9. NMR Valtice
 19. EPR seminář (26.-28.5.1993) - KFCH CHTF STU - Pezinská Baba
 24. NMR seminář (26.-29.4.1994) - 10. NMR Valtice

Letní školy NMR spektroskopie

- Letní škola NMR pro začátečníky (23.-27.9.1974)
 spolu s pobočkou ČSVTS Lachema Brno, 21 účastníků,
 přednášející : M. Holík, M. Turečková, M. Navrátil
- Letní škola NMR pro začátečníky (22.-26.9.1975)
 spolu s pobočkou ČSVTS Lachema Brno, 23 účastníci,
 přednášející : M. Holík, M. Navrátil
- Letní škola NMR pro pokročilé (28.8.-1.9.1978),
 spolu s pobočkou ČSVTS Lachema Brno, 17 účastníků
 přednášející : M. Holík, M. Turečková, V. Sklenář, J. Komenda
- Letní škola NMR pro začátečníky (27.-31.9.1979),
 spolu s pobočkou ČSVTS Lachema Brno, 24 účastníci,
 přednášející : M. Holík, M. Turečková, V. Sklenář
- Letní škola NMR II (31.8.-4.9.1981)
 spolu s pobočkou ČSVTS Lachema Brno, 16 účastníků
 přednášející M. Holík, M. Turečková, V. Sklenář, M. Hájek
- Letní škola 2D-NMR spektroskopie (11.-15.4.1983)
 spolu s SVŠT Bratislava v Kočovcích, 37 účastníků
 přednášející : J. Zajíček, J. Schraml, I. Goljer, R. Palovčík,
 T. Liptaj, V. Mlynárik, J. Halánek, Z. Starčuk, L. Malík, M. Lewitt
- Letní škola NMR - základní kurs (27.-31.8.1984)
 spolu s pobočkou ČSVTS Lachema Brno, 22 účastníci
 přednášející : M. Holík, M. Turečková, V. Sklenář
- Letní škola NMR - pulsní techniky (26.-30.8.1985)
 spolu s pobočkou ČSVTS Lachema Brno, 18 účastníků
 přednášející : M. Holík, M. Turečková, V. Sklenář
- Letní škola pulsní NMR spektroskopie (15.-19.6.1987)
 dopolední program při 17. NMR semináři ve Valticích,
 43 účastníci, přednášející : T. Liptaj, D. Uhrín, J. Bella,
 I. Goljer, P. Trška, Z. Starčuk, R. Fiala, V. Mlynárik, J. Zajíček

ANALYTIKA 94

(Mnichov, 19. - 22. dubna 1994)

Pavel Matějka, Ústav analytické chemie VŠCHT Praha

Ve dnech 19. až 22. dubna se v Mnichově konal 14. mezinárodní veletrh pro biochemickou a instrumentální analýzu, diagnostiku a laboratorní techniku - Analytika 94. Veletrh byl doprovázen konferencí zaměřenou na tři tematické okruhy : (1) analytické metody a aplikace, (2) biochemická analýza a (3) klinická chemie a lékařská laboratorní diagnostika. Taktéž samotný veletrh byl rozčleněn do tří oblastí : (1) analýza (instrumentální analýza, bioanalýza, chromatografie), (2) diagnostika (lékařská diagnostika, chemikálie, reagentie) a (3) laboratorní technika (laboratorní technika a zařízení, laboratorní datové systémy a dokumentace).

Za podrobnější zmínku stojí katalog veletrhu vydaný jednak ve formě tištěné, jednak ve formě jedné 3,5" HD-diskety. Velmi pečlivě zpracovaný katalog je tvořen šesti kapitolami : (1) všeobecné informace, (2) přehled vystavovatelů včetně jejich úplných adres a telekomunikačního spojení (a) abecední, (b) podle zemí, (3) rejstřík nabízených produktů (německy, anglicky a francouzsky - tematický a abecední), (4) rejstřík vystavovatelů podle výrobního zaměření, (5) informace o konferenci, (6) přehled ochranných známek a názvů.

Např. v kapitole (3) najdete téma 2.5 Spektroskopické, fotometrické přístroje a metody čítající jedenáct subtémat, představujících různé typy spektroskopických technik a dále zvláštní kapitoly věnované kyvetám, speciálním nástavcům a jinému příslušenství. Pro každé subtéma pak nalezneme odkaz na všechny příslušné vystavovatele s údaji, kde je možné je kontaktovat na veletrhu či kdykoli později prostřednictvím již zmíněných adres a telefonních čísel, což lze vzhledem k rozsahu celého veletrhu pokládat za zvláště užitečné.

Ze spektroskopických témat si zvláštní zmínku zasluhuje velmi rychle se rozšiřující oblast "doplčků" a příslušenství. Např. škála komerčně dostupných nástavců pro infračervenou a Ramanovu spektroskopii je stále pestřejší, jak ve smyslu speciálních technik, tak v zaměření na různé typy vzorků. Jako perličku na závěr lze uvést nástavec pro měření Ramanových spekter přímo v komerčních (tzv. lékařských) lahvičkách v objemech od 50 do 500 ml.

Spektroskopická společnost Jana Marca Marci
 adresa sekretariátu : 186 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 : červen 1994
 Pouze pro vnitřní potřebu.
 Uzávěrka příštího čísla Bulletinu : září 1994

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

PŘIPRAVOVANÉ AKCE

Pracovní schůze OS elektronové a iontové spektroskopie se bude konat
dne 17. srpna 1994 ve 14 hodin
v zasedací síni Fyzikálního ústavu AV ČR, Cukrovarnická 10, Praha 6.
Na programu bude přednáška zahraničního hosta prof. Tilinina.

MEDIUM ENERGY ELECTRON SCATTERING IN SOLIDS :

Applications to electron spectroscopies

I. S. Tilinin

The study of fast electron interaction with solids in the energy range from 100 eV to several tens of keV is prompted by quickly developing surface sensitive techniques such as Auger and photoelectron spectroscopies, elastic peak electron spectroscopy and so on. It turned out that for random solids the electron transport problem might be solved on the basis of the generalized radiative field similarity principle. The latter states that the exact differential elastic scattering cross section in the kinetic equation may be replaced by an approximate one provided the conditions of radiative field similarity are fulfilled. Application of the generalized similarity principle has revealed many interesting features of electron transport and allowed to explain them in terms of simple physical parameters. A number of important problems relevant to quantitative surface analysis have been solved. Among them there are : determination of the attenuation length of Auger and photoelectrons, the angular and energy distribution in the near characteristic peak region, the escape probability of signal electrons as a function of depth of origin, the dependence of the photoelectron yield of the x-ray angle of incidence etc. The analytical results are compared with those found by Monte Carlo calculations and experimentally in a broad range of electron energies and scattering properties of solids and a good agreement is observed.