



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



Spektroskopická společnost

Jana Marca Marci

166 29 PRAHA 6, Thákurova

361

BULLETIN

SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
Jana Marca Marci

Číslo 76

listopad 1994

EAST EUROPEAN FURNACE SYMPOSIUM (EEFS)

je název první spektroskopické konference o elektrotermické atomizaci, konané ve dnech 4.-7.9.1994 ve Varšavě. Hlavním záměrem organizátorů bylo podnítit odbornou diskusi mezi odborníky z východní a západní Evropy, Ameriky i Dálného východu. Tématické okruhy konference lze rozdělit takto :

- techniky a materiály atomizátorů
- tvorba atomů a jejich rozložení
- kalibrační techniky
- sprážené techniky (separace, prekoncentrace, speciace)
- víceprvková stanovení pomocí ETA
- technika dávkování pevných vzorků
- aplikace.

Konferenci předcházel jednodenní kurs o praktických aspektech AAS s ETA, kde byly zmíněny otázky vývoje metod, správnosti a přesnosti, meze detekce, přípravy vzorků a validace dat.

Kurs AAS, stejně jako Symposium, se konal v areálu Vysoké vojenské školy ve Varšavě, o výborné zajištění se postaral tým pracovníků z universit vedený Dr.E.Bulskou.

Vysokou odbornou úroveň symposia slibovala již některá jména organizátorů jako : Prof.B.V.Lvov, dr.G.Schlemmer a dr.W.Slavin. Celkem se konference zúčastnilo 110 odborníků z 20 zemí. Vyzvaných přednášek bylo 9, krátkých referátů bylo prezentováno 17 a posterů 48. Z České republiky byli přítomni 4 účastníci. Jednalo se o špičkovou, ryze vědeckou konferenci bez jakýchkoli komerčních aspektů. Zasluhou sponzorů symposia, především firmy Perkin-Elmer, se podařilo významně snížit konferenční poplatky účastníkům ze zemí bývalé východní Evropy, a tím umožnit jejich větší účast.

Příští konference tohoto typu se bude konat za dva roky pod názvem European Furnace Symposium (EFS) a o místě konání bude rozhodnuto do konce letošního roku.

Jiřina Sysalová

13. MEZINÁRODNÍ HMOTNOSTNĚ SPEKTROMETRICKÁ KONFERENCE (13. IMSC)

13. mezinárodní hmotnostně spektrometrická konference se konala ve dnech 29.8. až 2.9.1994 v Budapešti. Stalo se tak na základě rozhodnutí mezinárodního vědeckého výboru v r.1988 v Bordeaux. Mezinárodní výbor tehdy podpořil návrh prof.I.Cornidese motivovaný do značné míry politicky, když symposium v Budapešti mělo umožnit účast vědeckých a odborných pracovníků ze zemí v té době ještě existujícího t.zv. socialistického tábora. Prof.Cornides svůj slib dodržel i v nových geopolitických podmínkách. Zredukovaný konferenční poplatek, další výhody a otevřené projevy jeho kolegiality k účastníkům z těchto zemí skutečně znamenaly, že počty účastníků z těchto zemí, nehledě k jejich svízelné ekonomické situaci, značně převyšovaly jejich účast na konferencích předchozích. Snad jedinou smutnou výjimkou byla slabá účast z České republiky, odkud bylo pouze 5 účastníků, tedy dokonce méně než před 3 roky v Amsterdamu na konferenci 12.

Celkem se konferenci účastnilo na 850 hmotnostních spektrometristů ze 43 zemí. Konference se konala v Budapeštském konferenčním centru (BCC) a na Universitě pro tělovýchovu (UPE). Bylo předneseno celkem 8 plenárních přednášek předních světových hmotnostních spektrometristů ve velké posluchárně Pátria (BCC) a 27 základních přednášek vyzvaných přednášejících paralelně ve 3 sekcích, z nichž 2 probíhaly v BCC a 1 v 300 m vzdálené posluchárně výstavní haly UPE. Zde byla stálá výstava zúčastněných firem (výrobců přístrojů, náhradních dílů a příslušenství, vydavatelů atd.) a denní prezentace plakátových sdělení, jichž bylo celkem uvedeno na 730. Plakátová sdělení byla rozdělena do 5 sekcí. Základní, instrumentační, organické, anorganické a vědy se vztahem k životu (life sciences). Již z pouhého výčtu jednotlivých plakátových sdělení lze učinit dosti přesné odhady o směrech vývoje hmotnostní spektrometrie v posledních 3 letech: největší počet sdělení 208 byl prezentován v sekci "life sciences", nejmenší 87 pak v sekci anorganické. Moderní směry hmotnostní spektrometrie se tedy převážně orientují na oblast organických látek, a to zejména na vysokomolekulární biopolymery (peptidy, proteiny, uhlohydráty, nukleotidy a pod.). Tomu odpovídá i orientace ve vývoji přístrojů. Největší pokroky za poslední 3 roky lze pozorovat ve vývoji a použití metody MALDI (laserová ionisace za asistence matrice) s průletovými analyzátory TOF a metody elektrospreje s iontovými zdroji při atmosférickém tlaku (API) a s kvadrupólovými analyzátory. MALDI metoda je dnes rutinní metodou pro stanovení molekulových hmotností a struktury vysokomolekulárních látek o stovkách tisíc až milionu daltonů. Přístroje MALDI jsou dnes běžně komerčně vyráběny nejméně 6 výrobci. Atmosférický zdroj umožňuje snadné napojení elektrospreje v kombinaci HPLC/MS či CZE/MS na mnoho typů analyzátorů, s výhodou pak na nízkonapětové analyzátory kvadrupólové. Mnohonásobně nabitě ionty při použití elektrospreje a dekonvoluční metoda pak umožňují velmi přesné stanovení molekulových hmotností o desítkách až stovkách tisíc daltonů s použitím kvadrupólového analyzátoru s běžným hmotnostním rozsahem kolem 1000 daltonů. Značné pozornosti se těší metody s uchováváním iontů: iontová cyklotronová resonance s Fourierovou transformací a iontová past, obě především díky perspektivní n-rozměrové analýze (MS) v čase. Iontová past jako levné zařízení se tak stává perspektivním analytickým zařízením hromadného použití, když firma Varian již v tomto uspořádání komerční využití představila a firma Finnigan ještě dokonalejší avisovala.

Rada přednesených vyzvaných přednášek byla velmi hodnotná svojí náplní (přednáška profesora Cookse o povrchové kolísání aktivaci

a disociačních mechanismech s ní spojených) či přehledností (prof. Hillenkamp o laserové ionisaci, prof. Arpino o kombinovaných metodách). Prof.F.McLafferty se jako vždy ukázal ve výjimečném světle tentokrát vysoce sofistickou přednáškou spojení elektrospreje s Fourierově transformovanou ICR, aplikovanou na biomolekuly. Mnozí v přednáškovém sále ji charakterizovali slovy "sen zítřků". Poněkud dlužny představám byly např. úvodní přednáška konference profesora Jenningse na téma "Nové trendy ve hmotnostně spektrometrické instrumentaci", profesora Čizova a některé další.

O české účasti již byla zmínka. Je poněkud smutné, že naše hmotnostní spektrometrie se v posledních letech ještě více než dříve ubírá převážně cestou GC/MS převážně triviálních aplikací v tom nejjednodušším provedení, kdy třeba aplikace chemické ionisace či metoda isotopického zředění jsou spíše výjimkou, o kombinaci LC/MS už ani nemluvě, byť protagonisté triviálních GC/MS metod se soustřeďují hlavně na oblast životního prostředí a o jejich finančních možnostech nelze tvrdit, že jsou malé. Snad jediným pracovištěm, které skýtá naději na renesanci naší hmotnostní spektrometrie v modernějším smyslu slova je pracoviště Mikrobiologického ústavu AV ČR, naskytnou-li se zde v blízké budoucnosti potřebné finanční zdroje.

Organisace konference, ač nedosahovala úrovně konference 12. v Amsterdamu, byla na dobré úrovni a nelze než našim maďarským kolegům a prof.I.Cornidesevi osobně pogratulovat.

RNDr.Miroslav Ryska, CSC

SEMINÁŘ OS HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE

Dne 5.září 1994 se v prostorách FJFI ČVUT v Praze konal seminář odborné skupiny hmotnostní spektrometrie. Díky tomu, že tento seminář navazoval na 13.mezinárodní hmotnostně spektrometrickou konferenci v Budapešti, podařilo se do Prahy pozvat řadu světově známých odborníků, takže i ti, kteří se do Budapešti nedostali, mohli nahlédnout do světové hmotnostně spektrometrické kuchyně a vyslechnout referáty o posledních lahůdkách, které se v ní připravují. A byly to skutečně lahůdky, o kterých se v Čechách obvykle nehovoří. Před zhruba 35 účastníky vystoupil nejprve Prof.Fred McLafferty, který v přednášce o tandemové hmotnostní spektrometrii biomolekul srozumitelně přiblížil techniky jako je FT-MS (ICR-MS) a její spojení s HPLC pomocí electrospray interference. Po přehledné přednášce Prof.Richtera "Electrospray Ionization: Applications in Glycoprotein and Glycan Analysis" vystoupil vynikající přednášející a pedagog Prof.Tureček z University of Washington s přednáškou o neutralizaci-reionizaci v hmotnostní spektrometrii a prof.Varmuza o chemometrických přístupech k získání strukturální informace z hmotnostních spekter. Ke konci semináře dostali příležitost i badatelé z Čech a Slovenska - Dr.Havlíček přednášel o analýze cyklosporinů metodou FAB a Linked-scan MS, zatímco Dr.Musil uvedl data o zjišťování elementárního složení látek statistickou analýzou GC/MS-SIM dat.

Vedle odborného programu byl pro účastníky semináře připraven i společenský program. V neděli procházka historickou Prahou na místa jako je Karolinum, Židovské město pražské a Pražský hrad a v pondělí po semináři neformální setkání účastníků u kvasnicového piva a pražských kulinářských specialit v Novoměstském pivovaru. Rozhovory u dubových stolů tak byly skutečně vydařenou tečkou za setkáním, které bylo pro české hmotnostní spektrometristy ojedinelým zážitkem a doufejme, že nikoli poslední akcí takového významu.

Ing.Petr Verner

XIII. MEZINÁRODNÍ KONFERENCE O VYSOCE ROZLIŠENÉ MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPII

Ve dnech 5. - 9. září 1994 se v polské Poznani konala již 13. mezinárodní konference věnovaná rotační a rotačně vibrační molekulové spektroskopii. Paralelně s touto konferencí proběhl workshop projektu ISORAC (projekt EU zaměřený na spektroskopické studie atmosferických plynů a polutantů, které jsou potřebné pro dálkovou detekci).

Konference se zúčastnilo téměř 200 účastníků z 18 zemí. Bylo prezentováno 15 vyžádaných přednášek, 18 krátkých orálních příspěvků a více než 120 vývěskových sdělení. Vedle tradičních témat (mikrovlánná spektroskopie, FTR, laser-diodová a laserová spektroskopie, problematika van der Waalových a krátce žijících molekul a iontů, problematika vysoce excitovaných stavů a molekulových klastrů) byla na konferenci preferována spektroskopie napojená na atmosférické problémy a současné teoretické aspekty vibračně rotační spektroskopie. Od těchto základních témat se odchylovala vyžádaná přednáška, která byla věnována souvislosti teorie chaosu a vibrační spektroskopie (J.P. Plaque) a přednáška věnovaná nejnovějším pokrokům v NMR spektroskopii (W.T. Raynes).

Diskuse u kulatého stolu o současnosti a především o budoucnosti molekulové spektroskopie měla sice renomované úvodní řečníky (T. Miller, A. Bauder, B. Žilinský, M. a B. Winnewisserovi), ale nedvedla k žádným konstruktivním závěrům, ani nepřinesla nové náměty.

Česká republika byla reprezentována jednou vyžádanou přednáškou (V. Špirko) a řadou posterů (S. Civiš, P. Pracna 2x, P. Soldán a Š. Urban 2x).

Z bohatého kulturního programu vynikl moderní balet na motivy Bizetovy Carmen v podání poznaňského baletu.

Na schůzi mezinárodního řídicího výboru bylo změněno jeho složení (dosavadní předseda J.T. Hougen odstoupil) a bylo rozhodnuto, že příští XIV. konference se bude konat v Praze v září 1996 za spoluorganizace Spektroskopické společnosti.

Dr. Štěpán Urban

EUCMOS XXII

(Essen, 11. - 16. září 1994)

Ve dnech 11. až 16. září probíhal v Essenu (SRN) 22. Evropský kongres molekulové spektroskopie, uspořádaný spektroskopickou skupinou Německé chemické společnosti (DASp GDCh) ve spolupráci s Univerzitou v Essenu a spektroskopickými ústavami ISAS (Dortmund a Berlin). Hlavním sponzorem konference byl Initiativkreis Ruhrgebiet (sdružení firem v oblasti Porúří).

Konference se zúčastnilo 464 účastníků z celé Evropy, USA, Kanady, některých zemí Asie a z Austrálie. Účastníků z České republiky bylo sedm (3 MFJ UK, 2 PŘF UK a 2 VŠCHT Praha).

Bylo předneseno 27 plenárních přednášek, 24 sekčních přednášek (ve dvou sekcích) vystaveno cca 370 posterů ze všech oborů molekulové spektroskopie. Velmi významný podíl prací byl zaměřen na studium biomolekul a na biochemické, biologické a medicínské aplikace spektroskopických metod (např. 6 plenárních přednášek a 11 sekčních). V závěru konference pak přednesla Prof. Grasselli-Brown (Athens, USA) přednášku na téma Analytická spektroskopie v 21. století, ve které shrnula dosavadní rozvoj spektroskopie v rámci vývoje lidské civilizace a pokusila se načrtnout významné směry rozvoje a budoucích aplikací spektroskopických technik.

Ze strany českých účastníků byla prezentována i sekční přednáška (Prof. K. Volka, VŠCHT Praha) a 9 posterů.

V rámci kongresu též proběhla výstava firem (18 výrobců spektroskopických přístrojů, 2 chemických společností a 5 vydavatelů chemické literatury). Na kongresu byla též prezentována pozvání na různé spektroskopické konference, které budou uspořádány v letech 1995 a 1996. S nezanedbatelným ohlasem se představila i 10. Spektroskopická konference pořádaná v příštím roce Spektroskopickou společností J.M. Marci v Lanškrouně.

Odborný program konference byl doprovázen společenským programem, zahrnujícím exkurzi muzea o historii Porúří a výlet do moderních průmyslových podniků (elektrárny, zpracování odpadů apod.).

Závěrem je třeba poděkovat hlavním organizátorům kongresu, Prof. Bernhardu Schraderovi (Universität Essen) a Prof. Ernst-Heiner Kortemu (ISAS Berlin) za umožnění účasti řadě badatelů ze střední a východní Evropy, za pohostinnost a hladký průběh celé konference. Takováto šířeji zaměřená konference poskytuje nové pohledy na studované problematiky, umožňuje navázání mezinárodních kontaktů a mnoho invence k další práci.

Dr. Pavel Matějka

12. SEMINÁŘ ATÓMOVEJ SPEKTROCHEMIE Štrbské pleso, 26.-30.9.1994

Technická univerzita v Košicích, katedra chemie její hutnické fakulty a Slovenská spektroskopická společnost uspořádaly seminář navazující na bohatou tradici počínající rokem 1970. V čele organizačního výboru velmi úspěšné akce stála Doc. Dr. Erika Krakovská. Zatím co úvodních 11 akcí bylo zaměřeno převážně na domácí (československé) publikum a počet účastníků významně nepřekračoval padesátku, letošní akce nabyla rozměrů konference s mezinárodní účastí (101 účastníků, z toho 33 zahraničních, 48 přednášek, 16 posterů). Mezi zahraničními hosty byly významné osobnosti jako např. Prof. H. Nickel (SRN), hlavní pořadatel C.S.I. 1995, nebo Dr. Gy. Záray, předseda organizace maďarských spektroskopiků a jiní. Hlavními obecnými tématy konference byly přípravy vzorků metodami atomové spektrometrie, novinky v technice elektrotermické atomizace. V krátkých sděleních a na posterch byly prezentovány výsledky konkrétních experimentů. Nezvykle velký počet sdělení byl z oboru emisní spektrografie, v souladu s východoslovenskou tradicí. Souhrny přednášek byly účastníkům předány ve sborníku.

K vysoké společenské úrovni konference, která proběhla v srdečném a přátelském ovzduší, přispěl brilantní přednáškou "Postavení vědy v kultuře a spektroskopie ve vědě" Prof. E. Plško. V rámci oficiálního zahájení semináře jsem byl pořadatelem vyzván, abych účastníky seznámil s činností Spektroskopické společnosti JMM. Jménem naší Společnosti jsem veřejně předal medaili J.M. Marci rektorovi TU Košice, Prof. Karolu Flóriánovi, DrSc. Velkému zájmu nejen slovenských ale i zahraničních účastníků se těšil plakát o díle J.M. Marci s pozvánkou na 10. spektroskopickou konferenci do Lanškrouna 1995.

Dr. Zdeněk Slovák

ZPRACOVÁNÍ VZORKŮ PRO ATOMOVOU SPEKTROMETRII Čeložnice, 17.-20.10.1994

Katedra analytické chemie Masarykovy university v Brně a Spektroskopická společnost JMM uspořádaly seminář věnovaný přípravě a

zpracování vzorků při analytických postupech využívajících jako koncovek metod atomové spektrometrie. Semináře se zúčastnilo na 70 pracovníků převážně z laboratorí zabývajících se praktickou analytikou. Tomu odpovídala i koncepce programu, jehož téžistém byly všeobecné přednášky připravené předními odborníky (Šulcek, Mader, Dočekal, Kubán a další) na témata zadaná organizačním výborem, pokrývající prakticky celou problematiku rozkladů, zpracování (separační a obohacovací techniky) a dávkování roztoků a případně pevných vzorků pro metody AAS a ICP AES. Kromě tohoto "školicího" programu zazněla i krátká sdělení účastníků, věnovaná řešení konkrétních analytických problémů. Výhodou akce byla "izolace" všech účastníků v odlehleém rekreačním objektu "Lesanka" v krásném prostředí Slováckých Chřibů.

Dr. Zdeněk Slovák

KONFERENCE V ZAHRANIČÍ

Plasma Spectroscopy Winter Conference
Cambridge, UK, 8.-13.1.1995
Dr.J.R.Dean
Dep. of Chemical and Life Sciences
University of Northumbria at Newcastle
Ellison Building
Newcastle-upon-Tyne NE1 8ST
United Kingdom

Pittsburgh Conference
on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy
New Orleans, USA, 6.-10.3.1995
The Pittsburgh Conference
300 Penn Center Blvd, Suite 332
Pittsburgh, PA 15235-5503
USA

The L.H.Sutcliffe Magnetic Resonance Symposium
(covering ESR and NMR)
Guildford, UK, 24.3.1995
Dr.D.G.Gillies
University of Surrey, Dep. of Chemistry
Guildford, Surrey GU2 5XH
United Kingdom

EMAS 95
Conference on Modern Developments and Applications in
Microbeam Analysis
St.Malo, France, 14.-18.5.1995
EMAS Secretariat-RIKILT-DLO
P.O.Box 230
NL-6700 AE Wageningen
The Netherlands

ASMS Conference on Mass Spectroscopy
Atlanta, Georgia, 21.-26.5.1995
ASMS-815 Don Gaspar
Santa Fé, NM 87501
USA

PŘIPRAVOVANÉ AKCE :

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JMM
odborná skupina vibrační spektroskopie

ve spolupráci

s Ústavem analytické chemie VŠCHT

pořádají kurzy

a) MĚŘENÍ INFRAČERVENÝCH SPEKTER
(30.1.-3.2.1995)

b) INTERPRETACE VIBRAČNÍCH SPEKTER
(6.2.-10.2.1995)

Kurzy se budou konat na VŠCHT, Praha 6, Technická 5.
Zahájení obou kurzů vždy v pondělí v 9.00 hod.

Program : dopoledne přednášky, odpoledne cvičení na přístrojích

Účastnický poplatek na kurz
pro kolektivní členy Společnosti 1 200 Kč
pro ostatní 1 500 Kč

Předběžnou přihlášku zašlete nejpozději do 20.prosince 1994
na adresu sekretariátu nebo tel/fax č. (02) 3112343.

Přihlášení účastníci dostanou program kurzu a složenku
na zaplacení účastnického poplatku.

Spektroskopická společnost Jana Marca 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 : říjen 1994
Pouze pro vnitřní potřebu.
Uzávěrka příštího čísla Bulletinu : leden 1995

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

Spektroskopická společnost JMM
Thákurova 7
166 29 Praha 6

Odešlete do 20.12.1994

Předběžná přihláška

na kurz "Měření infračervených spekter"
(30.1.-3.2.1995)

na kurz "Interpretace vibračních spekter"
(6.2.-10.2.1995)

Příjmení, jméno, titul :

Zaměstnavatel :

Adresa :

Datum :

Podpis :