Spektroskopická společnost
Jana Marca Marci
160 09 PRAHA 6 Thákurova 7
386

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI

BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARCA MARCI

Číslo 86 **prosinec 1996**

The 14th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy

Štěpán Urban

Ve dnech 9.-13. září 1996 se za přítomnosti 258 aktivních účastníků (16 z ČR, 24 ze Severní Ameriky, 166 ze zemí EU, 28 ze zemí bývalého SSSR, 13 z Polska, 8 z Japonska, 2 z Izraele a 1 ze Slovenska) a 41 doprovázejících osob konala v areálu koleje 17. listopadu v Praze 8 - Troji již 14. Mezinárodní konference o molekulové spektroskopii vysokého rozlišení. Téma konference postihovalo, podobně jako v případě předchozích konferencí, především problematiku rotační a rotačně vibrační spektroskopie, a to jak z experimentálního, tak i z teoretického pohledu.

V oblasti experimentu konferenční příspěvky směřovaly především do následujících oblastí:

- rozvoj metod nelineární laserové a sub-Dopplerovské spektroskopie
- rozvoj mikrovlnných technik a rozšiřování jejich použitelnosti do daleké IČ oblasti
- měření krátkodobě žijících a nestabilních molekulárních specií (ionty, radikály, Van der Waalsovy systémy atd.)
- přesná měření standardů a referenčních dat pro monitorovací účely
- měření intenzit
- časově rozlišená spektroskopie
- elektronicky vzbuzené stavy
- FTS vysokého rozlišení od mikrovlnné oblasti až do oblasti viditelné.

Konferenční příspěvky, které se orientovaly převážně do teorie, byly zaměřeny především na následující problematiku:

- výpočet vlastností molekul s potenciálních funkcí
- problematikou nerigidních systémů (vnitřní rotace, inverze, Van der Waalsovy systémy)

- problematikou efektivních rotačních a rotačně vibračních Hamiltoniánů, operátorů dipólového momentu, kvadrupólových, spin-rotačních, spin-spinových a jiných efektů
- analýzou vysoce rozlišených (silně porušených) spekter v termínech molekulárních Hamiltoniánů a potenciálních funkcí
- problematikou struktury molekul.

Oblast aplikací byla převážně zaměřena na monitorování polucí, složení atmosféry a astrofyzikální studie. Ze čtrnácti vyzvaných přednášek, vybraných mezinárodním programovým výborem, je vhodné zmínit především obě úvodní: „O mezihvězdné a laboratorní spektroskopii v terahertzové oblasti" prof. G. Winnewissera a „O vysoce citlivých laserových spektroskopiích v IČ" prof. M. Ignuscio, které nasadily velmi vysoký standard konference. Z dalších je možné připomenout vystoupení T. Millera (Laser spectroscopy of cold, reactive intermediates), J. Troe (Photodissociation from bound electronic states), J.-M. Flauda (Impact of high resolution molecular spectroscopy on atmospheric retrievals), P. J. Sarreho (Diffuse interstellar bands), P.F. Bernath (Infrared emission spectroscopy and molecular astronomy), A. Walterse (Time-resolved rotational spectroscopy of reactive molecules) a A. Camparguea (Intracavity laser spectroscopy). Celkem bylo prezentováno téměř 50 přednášek a přibližně 200 vývěskových sdělení.

Kromě odborného programu lze hovořit i o úspěšném společenském programu. Vedle úvodní slavnosti večeře to byl zdařilý „Ladies program" a především vynikající komorní koncert Talichova kvarteta v prostorách Anežského kláštera, na který navazoval banket. Ke slavnostnímu rázu večera přispělo i udělení tří čestných medailí J. M. Marci profesoru G. Winnewisserovi, Dr. J. K. G. Watsonovi a Dr. V. Špirkovi.

Příští, 15. konference se podle rozhodnutí mezinárodního výboru bude konat opět v Praze, první týden v září roku 1998 v návaznosti na pražský EUCMOS XXIV. Podrobnosti o programu a náplni konference, jak právě skončené, tak i konference příští, jsou k dispozici na WWW strankách pod adresou:

http://wcpj2.chemie.uni-wuppertal.de/praha96/prague.html.

Laureáti Medaile J. M. Marků za molekulovou spektroskopii 1996
(připravil Štěpán Urban)

Ing. Vladimír Špirko, DrSc

Vladimír Špirko (*1942), vědecký pracovník Ústavu fyzikální chemie AV ČR je nesporně jedním z nejvíce renomovaných spektroskopiků v České republice. Během své dosavadní odborné kariéry sepsal nebo je spoluatorem více než 120 původních sdělení, která jsou vě nována teoretickým aspektům molekulové spektroskopie a která jsou téměř výhradně publikována v renomovaných mezinárodních časopisech (J. Mol. Spectrosc., J. Chem. Phys., Chem. Phys. Lett., J. Phys. Chem., Mol. Phys. atp.). V posledních letech se zaměřuje na studia rotačně vibrační dynamiky flexibilních silně anharmonických molekul,

systémů s vo-díkovou vazbou, van der Waalsových komplexů, molekulárních klastrů a na některé pro-blémy matematických metod chemické fyziky.

Vladimír Špirko úzce spolupracuje s řadou domácích i zahraničních pracovišť (např. s MPI Garching, s universitami ve Waterloo (CND), v Exteru (GB), v Aarhusu (DK), ve Wuppertalu, s MFF UK atd.) a je často zvaným hostem mezinárodních konferencí. Z jeho četných mezinárodních aktivit je třeba připomenout např. členství v ediční radě J. Molecular Spectroscopy nebo předsednictví lokálního organizačního výboru pražské mezinárodní konference o molekulové spektroskopii vysokého rozlišení.

Vladimír Špirko vychoval řadu aspirantů, postgraduálních studentů a vedl několik diplomových prací.

Profesor Gisbert Winnewisser

Gisbert Winnewisser (*1936) je žákem prof. Gordyho a prof. Herzberga, působil na Duke University, v Herzbergově ústavu v Ottawě, na universitě ve Vancouveru, na MPI pro astrofyziku v Bonnu. Nyní je ředitelem I. fyzikálního ústavu univerzity v Kolíně, kde intenzivně rozvíjí molekulovou astrofyziku a molekulovou spektroskopii. Gisbert Winnewisser se podílel na realizaci stometrového plně pohyblivého mikrovlnného radioteleskopu u Efelsbergu (společně s MPI) a později vybudoval submilimetrovou observatoř I. fyzikálního ústavu na Gornegrattu u Zermatu osazenou třímetrovým radioteleskopem. Tato observatoř se specializuje na měření molekulových spekter z mezihvězdného prostoru pro mapování teploty a koncentrace některých základních molekulových specií. V oblasti laboratorní spektroskopie se G. Winnewisser zabývá laserovou infračervenou spektroskopií, vysoce rozlišenou FTS, mikrovlnou spektroskopií a v poslední době dosáhl jedinečných výsledků v submilimetrové spektroskopii (10 - 200cm^{-1}), kde měří s přesností lepší než 1 kHz (v saturačním uspořádání).

Gisbert Winnewisser je autor nebo spoluautor více než 300 odborných sdělení, napsal 6 monografií (většinou věnovaných astrofyzice mezihvězdného prostoru), je jedním z nejžádanějších přednašečů na mezinárodních konferencích, je členem European Space Agency, členem rady nadace A. von Humboldta, členem senátu DFG a koordinátorem několika astrofyzikálních projektů. Prof. Winnewisser přednáší fyziku a molekulovou spektroskopii a vychoval několik desítek postgraduálních studentů.

V roce 1994 obdržel prestižní „Philip Morris cenu" za spektroskopický výzkum mezihvězdného prostoru.

HILGER
CS, s.r.o.

Výhradní zastoupení pro Českou a Slovenskou republiku firem:

Thermo Jarrell Ash - USA
Hilger Analytical - Anglie
Ströhlein - SRN
TN Spectrace - USA
Intertech Corporation - USA

Prodej, servis a poradenství v oblastech:

- **Optické emisní spektrometry - ICP, jiskrové, GDS**
- **Energodisperzní rentgenové přístroje - laboratorní, mobilní**
- **Analyzátory kovů a pevných látek - C, S, N, O, H**
- **Analyzátory organických složek - AOX, EOX, POX, TX, TOC, TC, TIC, AOS**
- **Přístroje pro kontrolu životního prostředí - emise, imise, odběrové systémy**
- **Detektory plynů**
- **Analytické váhy, Laboratorní pece**

Hilger CS, s.r.o.
budova Unigeo
Místecká 258
Ostrava - Hrabová
720 02

Tel./Fax: 069 / 358682
Tel.: 069 / 3624 kl. 302
E-mail: hilger@vsb.cz
Další informace - Internet:
http://www.vsb.cz/~hilger/

Dr. James K. G. Watson

J. K. G. Watson (*1936) je žákem profesora J. Millse, H. Nielsena a G. Herzberga. Působil na univerzitách v Readingu (GB), v Columbusu (OH) a v Herzbergově ústavu pro astrofyziku v Ottawě. Po smrti Haralda Nielsena je považován za největší autoritu v oblasti teorie molekulové spektroskopie, zejména pak spektroskopie rotační, vibrační, vibračně rotační, včetně jemných a hyperjemných efektů. Odvodil korektní rotačně vibrační Hamiltonián (který je znám také jako Watsonián) a příslušnou teorii rozvinul do vysokých řádů aproximace systematickým užíváním metody kontaktních transformací. Krom toho vybudoval teorii tzv. efektivních Hamiltoniánů, které jsou základním prostředkem analýzy vysoce rozlišených spekter.

Jim Watson publikoval sám nebo se svými spolupracovníky více než 220 původních sdělení a je autorem čtyř vynikajících přehledných referátů (jednou s M. R. Alievem), které vyšly v knižních monografiích a které patří k vůbec nejcitovanějším pracím v oblasti molekulové spektroskopie. Podobné pozornosti se dostalo i řadě jeho původních sdělení, která jsou v přehledech Citation Index dlouhodobě na předních místech.

Jim Watson je členem ediční rady časopisu Molecular Physics a trojčleného Editorial Committee J. Mol. Spectroscopy, dále je členem komise IUPAC pro spektroskopii, Royal Society of Canada, komise pro udělování Rutherfordovy medaile za fyziku a členem mezinárodního výboru pražské konference o spektroskopii vysokého rozlišení.

Spektroskopie radia
Miloslav Vobecký

V roce stého výročí Becquerelova objevu fundamentální vlastnosti hmoty připomeňme nezanedbatelnou úlohu spektroskopie v počátcích rozvoje poznání radioaktivity při dokazování existence radioaktivního prvku radia.

O emisi neviditelného záření uranu vykazujícím vlastnosti podobné pronikavému záření, krátce před tím objeveném W. C. Roentgenem, referoval poprvé francouzský badatel Henri Becquerel na zasedání pařížské Akademie věd 24. února 1896 /1/. Od prvního pozorování do té doby neznámého jevu dospěl postupně k poznání, že pronikavé záření je uranem emitováno spontánně a nezávisle na jeho chemické či fyzikální formě i vnějších podmínkách. V dalším studiu tohoto jevu zjistila M. Sklodowska - Curieová vyšší specifickou radioaktivitu minerálů uranu a thoria ve srovnání s jejich syntetickými sloučeninami /2/. Došla tak k závěru, že přírodní minerály uvedených prvků obsahují další silně radioaktivní prvek. Z jáchymovského smolince pak M. a P. Curieovi a chemik G. Bémont při separaci prvků obvyklým postupem kvalitativní chemické analýzy zjistili radioaktivitu ve frakcích bismutu a barya /3,4/. Tato radioaktivní individua provázející uvedené separované prvky považovali za nové radioaktivní prvky a nazvali je poloniem a radiem. Nezbytnou součástí důkazu existence nového prvku je zjištění vlastností určujících jeho postavení v periodic-

kém systému prvků, o čemž vypovídají především atomová váha, chemické, fyzikální a spektroskopické vlastnosti.

Již v prvním oznámení objevu polonia /3/ je zmíněn neúspěšný pokus o podporu důkazu existence tohoto nového radioaktivního prvku spektroskopickou metodou, který provedl E. Demarcay. Uranové minerály dostatečného geologického stáří (dceřinné produkty rozpadové řady uranu jsou v radioaktivní rovnováze) obsahují v tuně uranu 0,34 gramů radia ^{226}Ra a jen 75 mikrogramů polonia ^{210}Po. Proto teprve u radia se podařilo v chloridu barnatém frakcionací obohaceným radiem nalézt vedle čar barya, olova a platiny (z elektrod) alespoň intenzivní linku radia. Učinil tehdy závěr /5/, že přítomnost linky 381,48 nm svědčí o existenci malého množství nového prvku ve vzorku chloridu barnatého pana a paní Curieových. V chloridu barnatém s vyšším obohacením radiem našel Demarcay /6/ kromě intenzivní linky 381,48 nm dalších 14 linek radia. Preparáty radia získávali Curieovi zpracováním velkých množství nerozpustných zbytků odpadajících z loužení uranu ze smolince při výrobě uranových barev (pigmentů), které sloužily převážně k barvení skla. Technologii tehdy unikátního chemického zpracování smolince vypracoval jáchymovský hutník Adolf Patera, tato výroba byla v Jáchymově zahájena roku 1856. Spektroskopii radia se posléze zabývali W. Crookes, F. Exner, E. Haschek, C. Runge a J. Precht. V preparátech obsahujících jen tisícinu procenta radia byly zcela zřetelně registrovány nejintenzivnější linky 468,24 nm a 381,46 nm. F. Giesel zjistil, že radium barví nesvítivý plamen Bunsenova kahanu karmínově. Mezi tehdy nalezenými radioaktivními prvky (Po, Ra, Ac) bylo radium po určitou dobu jediným prvkem, jehož existence byla potvrzena zjištěním základních chemických a fyzikálních vlastností (atomová hmotnost, připraveno kovové radium aj.), k čemuž přispěla i spektroskopie.

1 Becquerel, C. R. Acad. Sci. Paris, 122 (1896) 420-421
2 Sklodowska-Curie, C. R. Acad. Sci. Paris, 126 (1898) 1101-1103
3 Curie, M. Sklodowska-Curie, C. R. Acad. Sci. Paris, 127 (1898) 175-178
4 Curie, M. Curie, G. Bémont, C. R. Acad. Sci. Paris, 127 (1898) 1215-1217
5 Demarcay, C. R. Acad. Sci. Paris, 127 (1898) 1218
6 Demarcay, C. R. Acad. Sci. Paris, 129 (1899) 716-717

Seminář odborné skupiny rentgenové spektrometrie
Dr. Václav Macháček

Dne 4. 9. 1996 se konal jednodenní seminář v objektu RAKO I v Rakovníku. Na programu byla exkurze na pracovišti a seznámení účastníků s novým rentgenspektrometrem SRS 3000 firmy Siemens. V úvodu semináře byla přednáška o vlastním přístroji, jeho parametrech a možnostech použití. Pak následovala exkurze na pracoviště, kde byli účastníci seznámeni s analytickou problematikou závodu. Jednalo se především o analýzu hlavních složek v silikátech. Dále zde byly ukázány možnosti bezstandardového semikvantitativního stanovení s programem "semikvant". Při návštěvě byl předveden též poloautomatický tavící přístroj pro přípravu tenkých vzorků pro rentgenfluorescenční analýzu, výrobek firmy Linn.

Na pracovišti jsou pro běžný provoz připravovány vzorky lisováním. Kontrola správnosti stanovení lisovaných vzorků je kontrolována vzorky připravenými tavící metodou.

Semináře se zúčastnilo 19 odborníků.

Soutěž o nejlepší práci v oboru spektroskopie mladých autorů
Dr. Pavel Matějka - školská komise

Po několikaleté přestávce se letos opět uskutečnila Soutěž mladých autorů v oboru spektroskopie (do 35 let), a to v modifikované formě. Poprvé se soutěž skládala nejen z posouzení předložených prací oponenty, ale i z ústní perezentace jednotlivých přihlášených. Toto ústní kolo soutěže proběhlo dne 2.prosince 1996, a to v rámci schůze hlavního výboru Společnosti. Z jedenácti přihlášených se k ústní prezentaci dostavilo 10 soutěžících, z toho 6 v kategorii A (diplomových prací) a 4 v kategorii B (souboru publikací). Při hodnocení soutěžících se primárně posuzovala spektroskopická úroveň předkládaných prací, ale přihlíželo se i ke kvalitě ústní prezentace. Byla též diskutována formální úroveň přihlášek a do budoucna je třeba více dbát, aby především soubor prací byl opatřen krátkým souhrnem a vyjádřením spoluautorů k podílu soutěžícího na předkládané práci.

Shrňme si krátce výsledky soutěže:

V kategorii A obsadila **1.místo Mgr. Ivana Srnová** za diplomovou práci "Nové typy povrchů pro spektroskopii povrchem zesíleného Ramanova rozptylu", **2. cena** byla udělena **Ing. Gabriele Budínové** za práci nazvanou "Využití spektroskopie ve střední infračervené oblasti pro stanovení glukosy". **3. místem** byl v důsledku horší úrovně ústní prezentace jinak vysoce kvalitní práce v oblasti hmotnostní spektrometrie oceněn **Ing. Petr Halada** se studií "Hmotnostně spektrometrická analýza aminokyselin přítomných v peptidových námelových alkaloidech".

V kategorii B nebyla udělena první cena, **2.cena** byla udělena **Dr. Janu Valentovi** za soubor studií týkajících se optických vlastností epitaxních vrstev ZnS. Byly uděleny též **dvě třetí ceny**, a to **Mgr. Petru Němcovi** za studie věnované časově rozlišené spektroskopii skel dopovaných polovodičovými materiály **a Mgr. Jiřímu Dědečkovi** za soubor prací věnovaný spektroskopickému studiu zeolitů ve vztahu k jejich katalytickým vlastnostem.

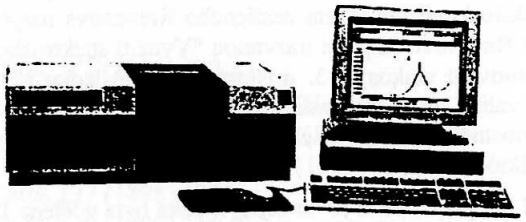
Sumárně lze hodnotit letošní ročník jako úspěšný vzhledem k solidnímu počtu účastníků. Drobné organizační nedostatky dané novým pojetím soutěže se snad podaří odstranit v příštím roce. Jeden ročník soutěže právě skončil, ale další se již začíná připravovat. Organizátoři soutěže se těší na opět hojný počet účastníků a dovolují si tímto vyzvat všechny čtenáře Bulletinu k propagaci soutěže. Bylo by pravděpodobně dobré zachytit zájem diplomantů bezprostředně po obhajobě diplomových prací a upozornit na soutěž všechny

Nicolet

INSTRUMENTS OF DISCOVERY

SPECIALISTÉ V OBORU FTIR

- infračervené spektrometry s Fourierovou transformací pro náročné aplikace i rutinní použití
- specializované databáze IČ spekter
- rychlá kvantitativní analýza ropného znečištění včetně jeho identifikace
- analyzátory olejů a plynů, IR mikroskopy, FT-Raman spektrometry
- spojení FTIR se separačními metodami a TGA
- zakázkový vývoj analytických metod včetně programování
- bezplatné předvedení přístrojů zájemcům s možností měření vlastních vzorků



NICODOM
REP. NICOLET INSTRUMENT
HLAVNÍ 2727, 141 00 PRAHA 4
Tel.: 02 - 76 68 59, - 76 49 97
Fax: - 76 68 59

odstřihněte a zašlete na naši adresu

PROSÍM O ZASLÁNÍ PODROBNĚJŠÍCH INFORMACÍ TÝKAJÍCÍCH SE :

.....
.....
.....

Jméno : ..... *Telefon :* .....
Adresa: .....
.....

doktorandy a aspiranty, kteří se zabývají spektroskopickými technikami. V letošním ročníku například chyběly práce z oblasti atomové spektrometrie či NMR spektroskopie.

Závěrem je třeba uvést, že základní informace o soutěži, pravidlech, letošním průběhu i poznámky k příštímu ročníku lze nalézt prostřednictvím sítě Internet. Průběžně aktualizované www stránky o soutěži jsou lokalizovány na URL:

http://staff.vscht.cz/matejkap/soutez/.

NABÍDKOVÁ A POPTÁVKOVÁ SLUŽBA ČLENŮM SPOLEČNOSTI

Škoda výzkum s.r.o., odbor chemie
Tylova 57, 316 00 Plzeň
tel. (019) 77 32415

nabízí k odprodeji:

- AAS Perkin - Elmer M 4000 na náhradní díly (oprava možná)
- rentgenový fluorescenční spektrometr Philips PW 1450 (rtg. lampy Au, W, Mo anoda + další náhradní díly).

Spektroskopická společnost Jana Marca Marci
adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6
redakční rada:
Dr. M. Fara, Doc. M. Gricová, Dr. K. Jurek, Dr. J. Sysalová, Dr. B. Vlčková
tech. redakce: P. Vampolová
redakční uzávěrka: prosinec 1996, uzávěrka příštího čísla: únor 1997

Pouze pro vnitřní potřebu.
Podávání novinových zásilek povoleno Ředitelstvím pošt Praha, čj. NP 2495/1993 ze dne 3. 1. 1994