



**Spektroskopická společnost**

Jana Marca Marci

166 29 PRAHA 6, Thákurova 7

398

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI



**BULLETIN**  
**SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI**  
**JANA MARCA MARCI**

Číslo 93

duben 1998

**K životnímu jubileu Miroslava Rysky**

Nikdo by asi neodhadl, že Dr. Miroslav Ryska, CSc., je už od 2. února tr. šedesátníkem. Mladistvé vzezření jubilanta a jeho pracovní elán jsou jakousi omluvou, že teprve s opožděním připomínáme jeho přínos Spektroskopické společnosti JMM v oboru hmotnostní spektrometrie.

M. Ryska se seznámil s hmotnostní spektrometrií při své diplomní práci na Chemické fakultě Moskevské státní univerzity, kde na katedře N. N. Semenova užíval již v letech 1957-61 spektrometr MS4 pro analýzu produktů katalytických reakcí. Po obhájení disertační práce v Ústavu makromolekulární chemie (Prof. O. Wichterle, 1966) se vrátil k hmotnostní spektrometrii a půldruha roku se na Univerzitě v Kolíně nad Rýnem zabýval analýzou produktů rozkladu kopolymerů styrenu a vinylchloridu s použitím tehdy nové metody - ionizace vysokým elektrickým polem. Po návratu zavedl v ÚMCH laboratoř hmotnostní spektrometrie vybavenou spektrometrem s dvoji fokusací, který desetiletí udržel v perfektním provozu. V r.1978 nastoupil do Výzkumného ústavu pro farmacii a biochemii, vybudoval i tam laboratoř hmotnostní spektrometrie a později se stal i vedoucím sekce analytické a bioanalytické. Od r. 1997 je ředitelem VÚFB Analytica, s.r.o.

Publikoval více než sto odborných článků z oboru hmotnostní spektrometrie, především o specifických analýzách ve složitých směsích, v posledních letech např. metabolitů léčiv v krvi, a také o užití hmotnostní spektrometrie k identifikaci a k objasňování struktury nových látek. V posledních letech pravidelně přednáší na VŠCHT Praha.

Zvláště významná je činnost, kterou věnoval v rámci sekce speciálních spektroskopických metod obecnému rozvoji hmotnostní spektrometrie. Uvedl tento obor ve Společnosti do života a stal se též jeho spiritus agens. Během desetiletí organizoval pravidelná roční setkání

spojená s přednáškami a diskusemi, v intervalech dvou či tří let pořádal internátní školy, často s účastí odborníků ze zahraničí, a dbal, aby program byl nejen přitažlivý pro všechny frekventanty, ale aby zbýval i čas na užitečné výměny názorů a zkušeností. Díky svým odborným znalostem a zkušenostem i svému společenskému vystupování získal přirozenou autoritu, která umožňovala udržovat na všech setkáních čínorodou přátelskou atmosféru a zájem o odborné diskuse. Odborné a organizační schopnosti byly oceněny i tím, že byl volen za člena vědeckých výborů pořádajících mezinárodní hmotnostně spektrometrická setkání a konference a že je od r. 1995 vybrán za editora mezinárodních časopisů Journal of Mass Spectrometry a Rapid Communications in Mass Spectrometry

Přejeme hodně zdraví a úspěchů v jeho další práci.

### **Seminář odborné skupiny rentgenové spektrometrie**

*Václav Macháček*

Odborný seminář se konal ve dnech 30. 3. – 1. 4. 1998 v hotelu Technik v Lázních Bohdaneč a na programu byly přednášky především o současných trendech rentgenové fluorescence. První byla přednáška o současných novinkách v oboru a následovala přednáška o základech výpočetní techniky metodou Monte Carlo, která je v současné době dosti používána pro výpočet vztahu mezi intenzitou a koncentrací. Dále byly zařazeny dvě přednášky o rentgenové fluorescenční metodě s fokusovaným budícím svazkem (průměr 0,1 – 1 mm). První přednáška o analytických metodách vysvětlovala techniku fokusovaného svazku a další pak byla věnována stanovení drahých kovů rentgenovým přístrojem s fokusovaným svazkem. Jelikož v současné době probíhají akreditace většiny laboratoří, byla zařazena přednáška o statistickém vyhodnocování výsledků.

V bloku přednášek o nových přístrojích a různých materiálech potřebných pro rentgenfluorescenční analýzu se prezentovalo 8 firem.

Během semináře byl účastníkům předán návrh odborného názvosloví oboru. Původně byl v programu vymezen čas na diskusi k tomuto tématu, avšak na návrh většiny účastníků bylo dohodnuto, že do 1 měsíce zašlou případné připomínky do sekretariátu Společnosti.

V závěrečné debatě bylo doporučeno, aby se seminář konal každý druhý rok a aby jeho trvání bylo o jeden den prodlouženo. Účast na semináři byla v této speciální sekci poměrně velká, celkem 40 účastníků. Po ukončení semináře byla pro zájemce uspořádána exkurze do laboratoře firmy Intertec v Pardubicích, které se zúčastnilo 20 zájemců.

# Nicolet

---

INSTRUMENTS OF DISCOVERY

## **SPECIALISTÉ V OBORU FTIR**

- infračervené spektrometry s Fourierovou transformací pro náročné aplikace i rutinní použití
- příslušenství k IR a FTIR spektrometrům
- specializované databáze IČ spekter
- rychlá kvantitativní analýza ropného znečištění včetně jeho identifikace
- modemové napojení na rozsáhlou databanku spekter
- analyzátor olejů
- analyzátory plynů - multikomponentová analýza až 20 složek bez separace
- infračervené mikroskopy
- 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

# PERKIN ELMER

Nad Ostrovem 1119/7  
147 00 Praha 4  
tel. 02-61222164-7, fax 02-61222168

Firma Perkin Elmer zajiš uje prodej a servis poístrojů v těchto oblastech:

- ♦ spektroskopie (AAS, ICP-OES, ICP-MS, UV/VIS, FTIR, Fluorescence)
- ♦ termická analýza (DSC, DTA, TGA, DMA, DPA)
- ♦ plynová chromatografie (GC, GC-MS)
- ♦ polarimetrie
- ♦ kapalinová chromatografie (LC, LC/MS, LC/MS/MS)
- ♦ laboratorní informační systémy (LIMS)
- ♦ elementární analýza

## ICP spektrometry firmy Perkin Elmer

### ICP-OES: řada spektrometrů Optima 3000

Tyto na světovém trhu nejprodáványější ICP spektrometry (přes 2000 instalací) patří do kategorie sekvenčně - simultánních přístrojů s možností současného měření až 73 prvků na více čarách současně a s výběrem z více než 5000 emisních čar. Optický systém na bázi polychromátoru s patentovaným SCD detektorem umožňuje měření emisní čáry a spektrálního pozadí ve stejném časovém okamžiku. Všechny verze jsou k dispozici v provedení s radiální plazmou (RL), axiální plazmou (XL) nebo i s kombinací obou uspořádání (systém "Dual View - DV").

**Optima 3100 (RL, XL, DV):** pokrývá UV oblast v rozsahu 165 až 403 nm

**Optima 3200 (RL, XL, DV):** pokrývá UV oblast v rozsahu 165 až 403 nm a dodatečně čáry pro Li a K ve viditelné oblasti

**Optima 3300 (RL, XL, DV):** pokrývá UV a viditelnou oblast v rozsahu 165 až 782 nm

### ICP-MS: Elan 6000

Na světovém trhu nejprodáványější ICP-MS spektrometr, který umožňuje velice rychlou stopovou analýzu vzorků s extrémně nízkými detekčními limity (na úrovni ppt) a se širokým lineárním dynamickým rozsahem.

## Kurzy vibrační spektroskopie 1998

Bohuslav Strauch

OS vibrační spektroskopie Společnosti pořádala opět kurzy měření a interpretace vibračních spekter. Připomeňme, že první kroky, motivované snahou jak co nejlépe a nejsprávněji měřit vibrační spektra, sahají do konce šedesátých let. Tehdy jsme vycházeli z učitelského působení Milana Horáka za asistence Stanislava Hilgarda na katedře organické chemie, z mých přednášek a výběrových cvičení diplomantů, jež jsem vedl na katedře anorganické chemie Přírodovědecké fakulty UK, z paralely brněnských univerzitních kolegů a také ze zkušeností, nabytých během mých stáží na TU Dresden (u prof. E. Stegera). S rozmáhající se aplikací infračervené spektroskopie jsme se u pracovníků z praxe setkávali s rostoucí řadou problémů a často hrubých chyb při měření spekter, neboť uživatelé byli vesměs samouci bez větších zkušeností.

Spiritus agens Milana Horáka generoval partu, v níž vedle nás, S. Hilgarda a J. Šilhy participoval tehdy J. Moravec, V. Šára a F. Hanousek, spektroskopisté z pracovišť v Řeži. Z přístrojů nejprve sloužily dva IČ-spektrofotometry UR20 s celkem solidním příslušenstvím, tříhranolový skleněný spektrograf ISP 51 s reflektorem a rtuťovými výbojkami k fotografickému záznamu Ramanových spekter, od r. 1974 přibyl laserový Raman-spektrofotometr JRS-S1 s Ar laserem, od r. 1982 byla IČ spektra snímána a zpracovávána spektrofotometrem Perkin-Elmer se stanicí dat, od poloviny 80. let začali naši frekventanti v kurzech poznávat přednosti a výhody interferometrů s Fourierovou transformací. Počátkem 90. let FTIR spektrofotometry naše kurzy plně ovládly a se stávajícím školitelským sborem lze dnes prakticky seznamovat zájemce se všemi současnými metodikami a postupy ve vibrační spektroskopii, včetně IR mikroskopie, NIR a FT-Ramanovy spektroskopie. Kurzy měření vibračních spekter byly pořádány zpočátku v nepravidelných intervalech s jedno- až dvouletou přestávkou, od poloviny 80. let takřka pravidelně každoročně, takže jimi prošla úctyhodná řada frekventantů z Čech, Moravy a Slovenska.

Z hodnotících anket a dalších kontaktů s absolventy vyplynulo, že vedle měřících technik je vážným problémem pro většinu uživatelů interpretace a identifikace ze spekter. Proto jsme připravili a v 90. letech zahájili samostatné týdenní kurzy interpretace vibračních spekter, jež se v současnosti těší značnému zájmu a oblibě. Nejlepším dokladem jejich přínosu jsou dosahované výsledky v závěrečné interpretační soutěži frekventantů, dotované cenami.

Účastníci jednotlivých kurzů obdrží od naší Společnosti absolventské osvědčení. Na základě svých poznatků z drážďanských kurzů a seminářů, z kurzů v Dortmundu (tehdy u prof. B. Schradera), v Überlingenu (Perkin Elmer Bodenseewerk) a v Anglii, avšak zejména z mnohaletých zkušeností ve spolupráci s někdejšími a stávajícím sborem učitelů našich kurzů si dovoluji tvrdit, že jsou naše školení minimálně na evropské úrovni. Je nutno připomenout, že nemalou měrou k tomu přispělo rovněž ve své době rakouské zastoupení firmy Perkin Elmer, dále firmy ChromSpec, Bruker a zejména v posledních letech fa NICO-

DOM, neboť v posledních pěti letech dominantními účastníky kurzů jsou uživatelé přístrojů Nicolet. Nyní ale k letošním kurzům.

### **1. kurz „Měření infračervených spekter“ 26. - 30. 1. 1998, 19 účastníků**

Kurz tradičně zahájil Doc. Strauch informacemi o kurzu a o literatuře ve vibrační spektroskopii. Frekventanti byli rozděleni do čtyř pracovních skupin pro praktická cvičení.

Základní pojmy z vibrační spektroskopie uvedl Dr. Hilgard, o principech a výhodách FTIR-spektrometrie ve srovnání s dispersní hovořil Dr. Pásztor, přípravě vzorků a technikám měření IČ spekter se věnovala Ing. Novotná, která rovněž pojednala o počítačovém zpracování spekter a spektrálních knihovnách. O reflexní spektroskopii pokračoval Ing. Machovič. Blízká IČ oblast a kvantitativní analýza byly na pořadu Ing. Tenkla. Následovalo spojení FTIR-spektrometrie s ostatními metodami (GC, LC, TGA atd.) - Dr. Pásztor. Doc. Strauch upozornil na chyby a nepravé pásy ve spektrech a širěji komentoval vibračně-spektroskopickou literaturu s vybranými recentními ukázkami. Doc. Horák se věnoval postavení a přínosu IČ spektroskopie vědě a praxi. Ing. Novotná spolu s Ing. Machovičem uzavřeli cyklus přednášek příklady praktického použití IČ spektroskopie, diskusí a vzájemnou výměnou zkušeností.

Odpolední programy vyplnila praktická cvičení skupin u přístrojů. Byla věnována metodice měření IČ spekter kapalin, plynů, tloušťce květy, kalibracím, manipulaci s optickým materiálem; v pevné fázi to byla příprava tablet a emulzí, problémy disperse vzorku a interakce s okénky resp. v tabletě; v reflexní spektroskopii byly aplikovány metody ATR a DRIFT. Další úlohou byla měření v blízké infračervené oblasti a kvantitativní analýza. Samostatným programem bylo zpracování spekter a vyhledávací programy v spektrálních knihovnách. Praktická cvičení vedly Ing. Kohoutová, Dr. Janečková, Ing. Budínová, Dr. Matějka, Dr. Pásztor a Mgr. Kesner. Ve středu odpoledne bylo skupině zájemců demonstrováno měření s infračerveným mikroskopem v systému Genesis-Mattson Mgr. I. Němcem, uživatelé přístrojů Nicolet měli vlastní seminář.

### **2. kurz „Interpretace vibračních spekter“ 2. - 6. 2. 1998, 29 účastníků**

Kurz po rozdělení příslušných pracovních materiálů zahájil Doc. Strauch úvodem do teorie vibračních spekter. Chemickými aplikacemi (charakteristické frekvence, vlivy spřažení a vnitromolekulární efekty) se zabýval Dr. Hilgard, Doc. Horák věnoval pozornost vnějším projevům interakce ve spektrech. O identifikaci látek ze spekter a IČ databázích přednášela Ing. Novotná. Kvantitativní analýza a použití chemometrie byla obsahem přednášky Ing. Tenkla. O Ramanově spektroskopii informovala Doc. Vlčková, Dr. Matějka demonstroval výukový program pro spektrální metody. Vibrační spektra anorganických látek, alespoň ve stručném přehledu, uvedl Doc. Strauch. Doc. Vlčková v závěru přednášek hovořila o souvislostech ve vibračních spektrech.

Významnou a náročnou součástí programu byla interpretační cvičení v analýze spekter a přiřazování spektrálních pásů, vedena Doc. Strauchem a Dr. Hilgardem. Ve spolupráci s Ing. Novotnou byl na závěr cvičení předveden názorný výukový počítačový program interpretace 15 spekter. Závěrečnou soutěž v interpretaci IČ spekter připravila opět Ing. Novotná s Ing. Machovičem a také již tradičně ji vyhodnotila. Mezi velmi dobrými výkony vynikl zejména Vítězslav Pěnička z katedry fyziky polymerů MFF UK, na druhém místě byla H. Drnovská (Fakulta chemie VUT Brno) a třetí R. Schoula (Celně-technická laboratoř, Praha).

Pro zajímavost uvádíme soutěžní spektra látek : toluen, anilin, benzoová kyselina, propionan sodný, diethylethylmalonát, isobutyronitril, 3-nonanon, nonylaldehyd, nonanová kyselina, 1,6-heptadien-4-ol, 2-jodpropan, 1-hexen. K spektrům byly udány sumární vzorce.

Závěrem by autor tohoto příspěvku rád poděkoval kolegům z Ústavu analytické chemie VŠCHT v čele s prof. Volkou a rovněž pracovníkům Centrálních laboratoří VŠCHT Praha za vytvoření dobrých pracovních podmínek a příjemné prostředí.

### **Setkání analytických chemiků k příležitosti 100. výročí narození prof. Františka Čůty**

Ke stému výročí narození prof. Františka Čůty připravuje Ústav analytické chemie VŠCHT v Praze spolu s odbornou skupinou analytické chemie ČSCh setkání analytických chemiků, jež se uskuteční **v pátek 20. listopadu 1998 na VŠCHT v Praze**. Organizátoři uvítají účast absolventů oboru od r. 1949 do současnosti. V rámci setkání bude též uspořádána celostátní soutěž odborných prací současných studentů oboru analytické chemie.

Zájemci o účast na setkání jsou vyzýváni, aby se přihlásili na adrese Ústavu analytické chemie VŠCHT co nejdříve; další informace o programu setkání obdrží pak v průběhu října.

Adresa:

Ústav analytické chemie VŠCHT

Technická 5, 166 28 Praha 6

tel.: (02) 2435 4043, fax: (02) 311 2828

e-mail: Jaroslav.Fogel@vscht.cz

---

**Spektroskopická společnost Jana Marci Marci**

adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6

redakční rada: Dr. M. Fara, Dr. K. Jurek, Dr. J. Sysalová, Dr. B. Vlčková

tech. redakce: P. Vampolová

redakční uzávěrka: duben 1998, uzávěrka příštího čísla: červen 1998