



SPRAVODAJ

Slovenskej spektroskopickej spoločnosti
člena Zväzu slovenských vedecko-technických spoločností



ISSN 1338-0656

Ročník 19, Číslo 1, 2012

Generálni sponzori Slovenskej spektroskopickej spoločnosti



The world leader in serving science

Na úvod

Milé kolegyne, milí kolegovia,
v minulom roku inicioval ZSVTS vznik
expertnej skupiny za SSS, ktorá by mala
slúžiť nielen pre účely Zväzu, ale aj pre
skvalitnenie činnosti našej spoločnosti. Jej
členovia (uvedení v abecednom poradí)
zastupujú viaceré oblasti spektroskopie, resp.
spektrometrie:

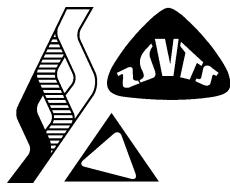
- prof. Dr. Yaroslav Bazel', DrSc.; spektrofotometria, optické sensory
- doc. Ing. Ernest Beinrohr, DrSc.; elektrochémia v atómovej spektroskopii
- RNDr. Marek Bujdoš, PhD.; hmotnostná spektrometria s indukčne viazanou plazmou (ICP MS)
- prof. Ing. Karol Flórián, DrSc.; atómová spektroskopia, chemometria
- RNDr. Ingrid Hagarová, PhD.; atómová absorpcná spektrometria (AAS)
- doc. RNDr. Jana Kubová, PhD.; optická emisná spektrometria s indukčne viazanou plazmou (ICP OES)
- doc. Ing. Tibor Liptaj, CSc.; nukleárna magnetická rezonancia (NMR)
- Ing. Daniela Mackových, CSc.; spektrochemická analýza geologických materiálov
- RNDr. Peter Matúš, PhD.; spektrochemická analýza geologických materiálov
- prof. Ing. Marcel Miglierini, DrSc.; Mössbauerova spektrometria a spektrometria s využitím synchrotronového žiarenia
- prof. Ing. Pavel Puliš, CSc.; atómová absorpcná spektrometria (AAS)

- doc. Ing. Dagmar Remeteiová, PhD.; spektrochemická analýza environmentálnych materiálov
- doc. RNDr. Silvia Ružičková, PhD.; spektrochemická analýza environmentálnych materiálov
- prof. Ing. Jozef Sitek, DrSc.; Mössbauerova spektrometria
- Ing. Monika Ursínyová, PhD.; spektrochemická analýza biologických materiálov
- doc. Ing. Viera Vojteková, PhD.; spektrochemická analýza environmentálnych materiálov
- doc. RNDr. Mária Žemberyová, PhD.; atómová absorpcná spektrometria (AAS)

S radosťou si vás dovoľujem ďalej informovať, že SSS bola vyhodnotená ako tretia najaktívnejšia zo 47 členských organizácií ZSVTS za rok 2011. Hlavný výbor SSS vyjadruje vdăku všetkým členom Spoločnosti, ktorí zorganizovaním mnohých odborných akcií prispeli k tomuto výsledku. Verím, že sa nám spoločnými silami podarí v Spoločnosti udržať takýto aktívny odborný život aj v roku 2012, kedy nás čaká o.i. aj náročná príprava a zorganizovanie jubilejnej XX. Slovensko-Českej spektroskopickej konferencie, spojenej s *European Symposium on Atomic Spectrometry (ESAS 2012)* vo Vysokých Tatrách, viď ďalej.

Peter Matúš

Slovenská
spektroskopická
spoločnosť, člen Zväzu
slovenských vedecko-
technických spoločností



Spektroskopická společnost
Jana Marka Marci

European Symposium on Atomic Spectrometry ESAS 2012

XX. Slovensko-Česká spektroskopická konferencia

7.-12. október 2012

Grandhotel Praha, Tatranská Lomnica, Vysoké Tatry

<http://www.spektroskopia.sk/esas-scsc/sk>

S podporou

Atomic and Molecular Spectroscopy Working Group of the Committee of Analytical
Chemistry of Polish Academy of Sciences

DASp, German Working Group for Applied Spectroscopy

Committee of Analytical and Environmental Chemistry of Hungarian Academy of Sciences

Generálni sponzori



MEDZINÁRODNÝ ORGANIZAČNÝ VÝBOR

K. Flórián (Slovensko) - predsedna
E. Bulska (Poľsko)
V. Kanický (Česká republika)
G. Schlemmer (Nemecko)
G. Záray (Maďarsko)

ORGANIZAČNÝ VÝBOR

J. Kubová (Slovensko) - predsedníčka
P. Matúš (Slovensko)
M. Bujdoš (Slovensko)
I. Hagarová (Slovensko)
M. Urík (Slovensko)
M. Miglierini (Slovensko)
V. Kanický (Česká republika)

EUROPEAN SYMPOSIUM ON ATOMIC SPECTROMETRY (ESAS) 2012

je medzinárodné stretnutie vedeckých pracovníkov v oblasti atómovej spektrometrie za účelom prezentácie najnovších vedeckých poznatkov, nových technológií a inštrumentácie, aplikácie ako aj možnosti získania novej spolupráce. Vzniklo v roku 2008 (Weimar, Nemecko) spojením dvoch vedeckých konferencií s históriaou od roku 1984 a 1994: *International Solid Sampling Colloquium with Atomic Spectrometry* a *European Furnace Symposium on Atomic Absorption Spectrometry, Electrothermal Vaporization and Atomization*. Posledný ročník ESAS sa konal v poľskom meste Wrocław v roku 2010. Na treťom ročníku sympózia budú pozvané významné osobnosti informovať o najnovších výsledkoch vedeckej práce, skúsenostiach ako aj svojich víziách pre budúci rozvoj atómovej spektrometrie.

XX. SLOVENSKO-ČESKÁ SPEKTROSKOPICKÁ KONFERENCIA

pokračuje vo svojej dlhodobej vedeckej spolupráci oboch národných spektroskopických spoločností. Stretnutia, organizované Československou spektroskopickou spoločnosťou v minulosti (do roku 1993), pokračovali samostatne ako národné Slovenské a České spektroskopické konferencie a od roku 2008 sú to opäť spoločné podujatia (XIX. SČSK v Častej-Papierničke, SR). Posledná, 14. Česko-Slovenská konferencia, sa konala v Litomyšli (ČR) v roku 2010. Cieľom XX. SČSK je poskytnúť spektroskopikom z univerzít, akademických pracovísk, štátnych a súkromných inštitúcií a laboratórií z rôznych oblastí priemyslu informácie o súčasnom stave rozvoja rôznych odborov spektroskopie a trendoch v jej aplikáciach na rôznorodé materiály. Spojenie ESAS 2012 a XX. SČSK je vynikajúcou príležitosťou pre stretnutia zahraničných a domácich spektroskopikov, na vytvorenie a posilnenie osobných kontaktov a vzájomnú výmenu skúseností a myšlienok.

TÉMY KONFERENCIE

- Spektroskopia a spektrometria: teória, techniky, trendy, vývoj a aplikácie v analýze chemických, environmentálnych, geologických, biologických, potravinárskych, farmaceutických, priemyselných a ďalších materiálov
 - Atómová spektrometria (AAS, AFS, OES, atď.)
 - Molekulová spektroskopia (UV-VIS, NMR, Raman, IČ, atď.)
 - RTG spektrometria (EDS, WDS, XRF, PIXE, XANES, EXAFS, atď.)
- Hmotnosťná spektrometria (ICP MS, ESI MS, MALDI, LC-MS, GC-MS, TIMS, SIMS, atď.)
 - Inštrumentálne rádioanalytické metódy (Gamma spektroskopia, NAA, atď.)
 - Mössbauerova spektroskopia
 - Laserová spektroskopia
 - Synchrotrónové techniky
 - Špeciálne spektroskopické techniky
 - Techniky úpravy a vnášania vzorky
 - Stopová a ultrastopová analýza
 - Špeciačná analýza
- Metrológia a zabezpečenie kvality výsledkov

ODBORNÝ PROGRAM

obsahuje vyzvané 30 min prednášky, ústne (20 min) a posterové prezentácie, venované jednotlivým oblastiam spektroskopie. V uvedených časových limitoch je zahrnutá aj diskusia. Dôraz bude kladený nielen na prezentáciu najnovších vedeckých poznatkov, nových technológií a inštrumentácie, ale tiež na aplikáciu a využitie spektroskopie v rozličných oblastiach praktického života. Oficiálnym jazykom konferencie bude slovenský, český a anglický jazyk. Vyzvané prednášky a ústne prezentácie v slovenskom alebo českom jazyku musia byť vizualizované v anglickom jazyku. K dispozícii bude dataprojektor. Postery (90 x 120 cm) musia byť pripravené v anglickom jazyku.

NA SPEKTROSKOPICKÚ TÉMU

**ESTIMATION OF THE MINIMUM
UNCERTAINTY OF
QUANTITATIVE SPECTROSCOPIC
ANALYSIS**

Joseph (Iosif) M. Dubrovkin

The Western Galilee College, Acre, Israel
dubrovkin@013.net.il

Abstract

It was found that the mean squared error of quantitative spectroscopic analysis of multicomponent mixtures depends on the relative weights of the pure-component spectra that serve as references. These optimal weights allow evaluating the minimal uncertainty of the analysis. The theoretical results are substantiated by computer modelling using simulated Gaussian spectra and the UV-VIS spectra of Excedrin tablets.

Keywords

spectroscopy, analysis, uncertainty

1. Introduction

Estimation of the measurement uncertainty in analytical spectroscopy [1-3] is of both theoretical and practical importance. New techniques and new mathematical algorithms of data processing aimed at decreasing the uncertainty of analytical results are continuously developed. However, it may well happen that the errors of concentration measurements performed by computer-aided analysis are close to the minimum achievable error level. In this case, it would be useless to further improve the employed mathematical procedures. Below we propose a new method of evaluating the lower error limit in quantitative spectroscopic analysis.

2. Theory

Consider a linear model of spectrum \mathbf{y} of an n -component "closure" mixture, which has the vector of the relative concentrations (fractions):

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ac} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1)$$

where $\mathbf{A} = \mathbf{KW}$, \mathbf{K} is the $m \times n$ matrix of the pure-component spectra measured at m points in solution with the vector of relative concentrations \mathbf{c}^{ref} , \mathbf{W} is the diagonal weight matrix with trace $\text{tr}(\mathbf{W}) = 1$, $\boldsymbol{\varepsilon}$ is the $m \times 1$ vector of the normal noise with zero mean and dispersion σ_y^2 . Let us evaluate the impact of matrix \mathbf{W} on the mean squared error (MSE) of the estimation of vector \mathbf{c} for different predictors.

2.1. Classical least squares predictor

The MSE of the classical least squares (CLS) estimation of \mathbf{c} [4],

$$\hat{\mathbf{c}} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{W})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{y}, \quad (2)$$

is equal to dispersion

$$\sigma_{\hat{\mathbf{c}}}^2 = \sigma_y^2 \sum_{j=1}^n D_j / W_{jj}^2, \quad (3)$$

where $D_j = \text{diag}_j[(\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1}]$ and "diag" designates the matrix diagonal.

The minimum of (3) over \mathbf{W} is

$$(\sigma_{\hat{\mathbf{c}}}^2)^{min} = \sigma_y^2 S^3, \quad (4)$$

where $S = \sum_{j=1}^n D_j^{1/3}$, while

$$\text{diag}_j \mathbf{W}^{opt} = D_j^{1/3} / S. \quad (5)$$

The ratio of the standard deviations of $\hat{\mathbf{c}}$ calculated for the non-optimal ($\text{diag}_j \mathbf{W} = W_{jj}^{centr} = 1/n$) and the optimal elements of matrix \mathbf{W}^{opt} (5) ($\sigma_{\hat{\mathbf{c}}}$ and $\sigma_{\hat{\mathbf{c}}}^{min}$, respectively) equals

$$R = n(\sum_{j=1}^n D_j / S^3)^{1/2}. \quad (6)$$

Thus, the choice of the relative weights of the columns of matrix \mathbf{K} in proportion to $\text{diag}_j \mathbf{W}^{opt}$ (5), with vector $\mathbf{c}^{ref} = \text{constant}$, yields the minimum variance (4). In general, the relative weights of the components of matrix \mathbf{K} can be changed by choosing the analytical points in a special way (the sparse-mode method) and/or varying the physical and chemical factors that affect the intensity of the component spectra (e.g., the solvent pH). Then, the optimality criterion for matrix \mathbf{K} will be the proximity of ratio R (6) to unity.

2.2. Regularized CLS predictor

For regularized estimation of \mathbf{c} [4],

$$\hat{\mathbf{c}} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{y}, \quad (7)$$

where α is the regularization parameter, \mathbf{I} is the identity matrix,

$$MSE = \sigma_{\hat{\mathbf{c}}}^2 + \mathbf{c}^T \mathbf{M} \mathbf{c}, \quad (8)$$

$$\text{where } \sigma_{\hat{\mathbf{c}}}^2 = \sigma_y^2 \text{tr}((\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha^2 \mathbf{I})^{-1}), \quad (9)$$

$$\mathbf{M} = ((\mathbf{I} + \alpha^2 (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1})^{-1} - \mathbf{I})^2. \quad (10)$$

Suppose that the columns of matrix \mathbf{K} are equal-width (w) components of a symmetrical Gaussian doublet which has its maxima at $\pm i_0$.

The relative intensity of the j -component is equal to W_j . In calculating the elements of matrix $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, the sums can be replaced by integrals over infinite limits if m is large enough:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = D \begin{vmatrix} R & p \\ p & 1/R \end{vmatrix}, \quad (11)$$

where $D = W_1 W_2 (\pi/2)^{1/2}$ and

$$R = W_1/W_2, p = e^{-8 \ln 2 (i_0/w)^2}.$$

Since vector $\mathbf{c}^T = [c, 1-c]$,

$$\mathbf{c}^T \mathbf{M} \mathbf{c} = k_2 c^2 + 2k_1 c + k_0, \quad (12)$$

$$\text{where } k_2 = m_{11} - 2m_{12} + m_{22},$$

$k_1 = m_{12} - m_{22}$, $k_0 = m_{22}$, and m_{ij} is the ij -element of \mathbf{M} .

Quadratic form $\mathbf{c}^T \mathbf{M} \mathbf{c}$ reaches its extreme at $c_{extr} = -k_1/k_2$. (13)

From (10) and (11) it follows that

$$m_{11} = q(p^2 + (U - 1/R)^2), \quad (14)$$

$$m_{12} = qp(2U - R - 1/R), \quad (15)$$

$$m_{22} = q(p^2 + (U - R)^2), \quad (16)$$

where q is a non-significant because it is reduced in (13) and $U = -\alpha^2/D$.

Since $\alpha^2 \ll 1$, term U^2 can be neglected. For strongly overlapped doublet, $p \approx 1$, so from (13)–(16) it follows that

$$c_{extr} = W_1. \quad (17)$$

Since the second derivative of (12) is positive at this point, the extreme (17) is a *minimum*.

The numerical evaluation of (8) showed that, for a doublet with strongly overlapping bands, standard deviation $MSE^{1/2}(\alpha_{opt}, c)$ has a global minimum at the optimal value of the regularization parameter (Fig. 1a) when $c = c_{extr}$ (17).

For a well-resolved doublet, α_{opt} is close to zero and $MSE^{1/2}(\alpha_{opt})$ is independent of c (Fig. 1b).

The above results are valid for the relative mean squared error (*RMSE*)

$$RMSE = MSE / \sum_{j=1}^2 c_j^2 \quad (18)$$

For a doublet with non-equal-width components the $RMSE(\alpha_{opt}, c)$ values also depend on the relative component concentration, but (17) is not satisfied.

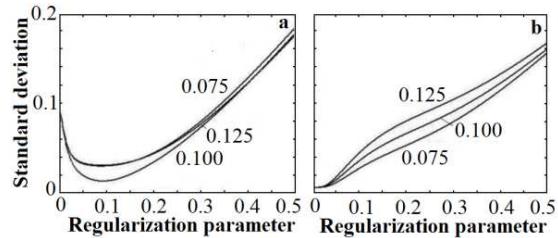


Fig. 1. The $MSE^{1/2}(\alpha)$ curves for doublets.

$\sigma_y = 0.001, W_1 = 0.1, x_0 = 0.05$ (a) and 2 (b).

The values of c are given next to the curves.

3. Model studies

In the case of three-component mixtures, the $RMSE(\mathbf{W})$ dependences were studied numerically using the regularized classical and inverse (ILS-ME-TR [5]) predictors, the Partial Least Squares (PLS) and the Principal Component Regression (PCR). Matrix \mathbf{K} was built on the basis of Gaussians (Fig. 2a-c) or the spectra of the components of Excedrin tablets (Fig. 2d).

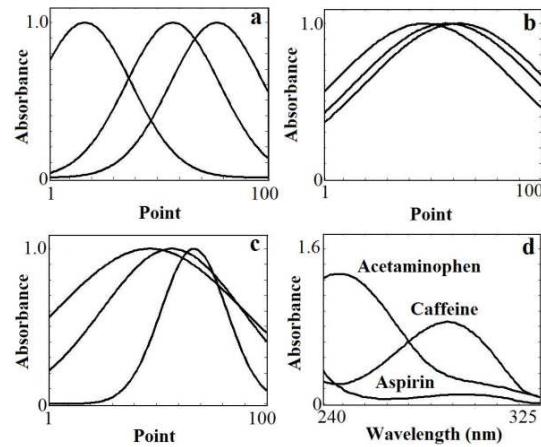


Fig. 2. Component spectra of data sets 1-3 (a-c) and of Excedrin tablets (d) ($c = 20 \text{ mg.l}^{-1}$ in water (69%), methanol (28%) and glacial acid (3%)).

Reproduced with permission from
www.dissolutiontech.com

For estimating the minimum uncertainty of the concentration vector, matrix \mathbf{K} should not have systematic errors, so vectors \mathbf{c}^{ref} must be equal to validation set vectors \mathbf{c}_v . The values of \mathbf{c}_v for data sets 1-3 are shown in Fig 3, while the \mathbf{c}_v values for Excedrin tablets were taken from [6]. The maximum signal-to-noise ratio of the mixture spectra ranged from 200 to 400. In all cases, $\sigma_y = 0.002$.

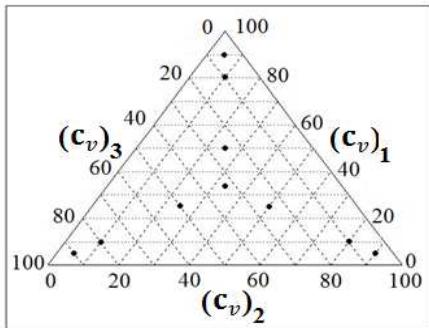


Fig. 3. The set of the relative concentrations (%)

We calculated

$$RMSE = \frac{\text{mean}(\sum_{i=1}^n ((\hat{c} - c_v)_i)^2)}{\sum_{i=1}^n (c_v)_i^2}, \quad (19)$$

for 100 uncorrelated noisy spectra of the same mixture. For all t mixtures of the same data set, the relative standard error of prediction was calculated as:

$$RSEP = \left[\frac{\sum_{j=1}^t RMSE_j \sum_{i=1}^n (c_v)_{ij}^2}{\sum_{j=1}^t \sum_{i=1}^n (c_v)_{ji}^2} \right]^{1/2} \quad (20)$$

The ILS-ME-TR estimation of c [5]:

$$\hat{c} = (\mathbf{AC}^T \mathbf{CA}^T + \alpha^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{AC}^T \mathbf{Cy}, \quad (21)$$

where \mathbf{C} is the concentration matrix of the calibration set. “Closure” matrix \mathbf{C}_c was built of all combinations of equidistant (step=0.1) numbers in the range of 0 - 1. “Non-closure” matrix \mathbf{C}_r included uniformly distributed numbers in the same range. The $RMSE(\alpha, \mathbf{W}^{opt})$ dependence reached its global minimum at α_{opt} .

The calibration set spectra matrix for the PLS and PCR methods is $\mathbf{Y} = \mathbf{CA}^T$. Two principal components were used for calibration. Ratio R similar to (6) was calculated as

$$R = \left[\frac{MSE(\mathbf{W}^{centr})}{MSE(\mathbf{W}^{opt})} \right]^{1/2}. \quad (22)$$

4. Results and discussion

The theoretical results obtained with the CLS predictor (Section 2.1) demonstrate the existence of optimal matrix \mathbf{W}^{opt} such that R is close to 1 and standard deviation $\sigma_{\hat{c}}$ is minimal (Table 1). The results of the computer modelling for other methods (Table 2) can be summarized as follows:

1. Large R ratios obtained for the minimum root $RMSE$ ($RRMSE$) values with a given calibration set (upper rows) using regularization methods show that the optimization procedure is most effective for strongly overlapping component

Table 1. Estimations for the CLS predictor

Data Set	$\sigma_{\hat{c}} \times 10^3$ min/max	R	\mathbf{W} elements $\times 10^3$
1	9.0	1.02	333-333-333
	21.2	1.39	900-50-50
2	460	1.11	333-333-333
	2270	1.45	900-50-50
3	27.6	1.06	333-333-333
	129	1.43	50-50-900
Excedrin	25.1	1.04	417-417-166
	37.8	1.37	469-469-62

spectra (data sets 2 and 3). For data set 1 and Excedrin tablets, optimization results in almost no improvement. This result can be accounted for by significant reduction of large random errors by the regularization procedure in the case of ill-conditioned matrix \mathbf{K} for data set 3 and especially for data set 2.

2. The comparison of the minimum $RRMSE$ values demonstrates that the PLS and PCR methods are preferable as compared to the regularization method for data set 1, where the component spectra are not strongly overlapped. For data set 2 the minimal uncertainty of the analysis was observed for the regularization methods. This result can be explained by comparing the noise filtering properties of the regularization method and the PLS and PCR procedures. While the latter methods are based on “cutting off” the higher principal components sharply, the regularization algorithm smoothly seeks for the optimal level of noise filtration.

3. The comparison of the $RSEP$ values obtained using the $RRMSE$ values (20) for each mixture shows that the ILS-ME-TR method is unsatisfactory for low-resolution data set 2. This is due to very large values of $RRMSE$ for some mixtures (see maximum $RRMSE$ values in lower row of Table 2).

4. The PLS- and PCR-aided analysis of “closure” mixtures using “non-closure” calibration matrix \mathbf{C}_r causes large errors in the case of certain mixtures (see maximum $RRMSE$ values in Table 2), which results in unsatisfactory $RSEP$ values (underlined).

5. Very small values of the minimal uncertainty of the quantitative analysis obtained for the ideal model which is free from systematic errors confirm the dominant role of these errors in real-life analysis [1].

Table 2. The calculated values for the three-component data sets, with optimal matrix \mathbf{W}^{opt}

Data Set	Parameter	Method					
		CLS-TR		ILS-ME-TR		PLS	
		C_c	C_r	C_c	C_r	C_c	C_r
1	$RRMSE(\%)$	0.26	0.26	0.27	0.072	0.12	0.074
		0.44	0.40	0.44	0.12	32	0.12
	R	1.3	1.3	1.2	4.3	121	4.1
		1.1	1.3	1.2	3.9	2.3	2.3
	$RSEP(\%)$	$0.80\pm$ 0.18	$0.31\pm$ 0.073	$0.33\pm$ 0.076	$0.090\pm$ 0.020	$14.6\pm$ 0.083	$0.089\pm$ 0.021
							$16.1\pm$ 0.26
2	$RRMSE(\%)$	0.21	0.22	0.29	0.37	0.61	0.33
		0.66	17.7	18.7	0.53	38.8	0.55
	R	89	120	17	19	33	17
		3.0	1.1	1.1	14	2.1	16
	$RSEP(\%)$	$0.40\pm$ 0.077	$9.5\pm$ 2.4	$10.3\pm$ 2.6	$0.43\pm$ 0.10	$18.1\pm$ 0.21	$0.40\pm$ 0.093
							$21.3\pm$ 0.38
3	$RRMSE(\%)$	0.40	0.45	0.36	0.12	0.16	0.10
		0.80	0.95	1.1	0.19	0.32	0.19
	R	2.7	3.5	4.3	8.0	168	8.7
		1.9	1.3	1.5	7.4	2.4	7.1
	$RSEP$	$0.54\pm$ 0.097	$0.76\pm$ 0.20	$0.76\pm$ 0.20	$0.14\pm$ 0.032	$14.6\pm$ 0.085	$0.14\pm$ 0.031
							$16.0\pm$ 0.79
Excedrin	$RRMSE(\%)$	1.00	1.01	1.02	0.36	0.48	0.58
		1.11	1.11	1.13	0.42	0.63	0.73
	R	1.2	1.3	1.2	2.3	26	33
		1.3	1.2	1.2	2.0	5.3	24
	$RSEP$	$1.06\pm$ 0.22	$1.05\pm$ 0.21	$1.06\pm$ 0.22	$0.39\pm$ 0.088	$0.57\pm$ 0.13	$0.65\pm$ 0.15
							$0.57\pm$ 0.13

The upper and the lower rows of $RRMSE$ and R correspond to the minimum and the maximum optimal $RRMSE$ values, respectively, within a given validation set

4. Conclusion

The proposed method appears to be most suitable for calculating minimal uncertainties in concentration determination for mixtures with claimed component quantities (e.g., pharmaceutical formulations). The result can be compared with the $RMSE$ value obtained for a particular analytical procedure and thus its effectiveness can be evaluated.

Estimation of $RMSE$ in the whole wavelength or in the sparse range by varying the measurement conditions can help to choose the optimal analytical method.

References

1. A.C. Olivieri, N.M. Faber, J. Ferré, R. Boqué, J.H. Kalivas, H. Mark, Pure Appl. Chem. 78 (2006) 633-661
2. E. Rozet, S. Rudaz, R.D. Marini, E. Ziémonts, B. Boulanger, Ph. Hubert, Anal. Chem. Acta 702 (2011) 160-171
3. I.M. Dubrovkin, J. Appl. Spectr. 43 (1986) 991-995
4. G.A.F. Seber, A.J. Lee, Linear Regression Analysis, John Wiley, New Jersey, 2003
5. C.D. Brown, Anal. Chem. 76 (2004) 4364-4373
6. M.H. Simonian, dissolutiontech.com/Dtressour/1995/Articles/DT199505_A02.pdf

SPRÁVY Z ODBORNÝCH AKCIÍ

CHEMICKÉ HORIZONTY 2012

1. február 2012

Bratislava

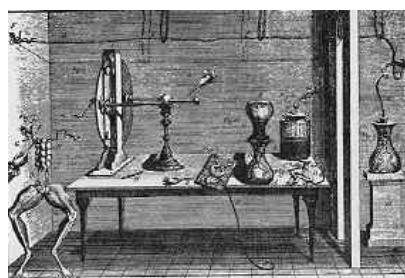
<http://www.schems.sk>

<http://www.spektroskopia.sk>

V rámci prednáškového cyklu Slovenskej chemickej spoločnosti (SCHS) v spolupráci so SSS vystúpil na svojej domácej pôde Ústavu analytickej chémie Fakulty chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave doc. Ing. Ernest Beinrohr, DrSc. s prednáškou Elektrochémia v atómovej spektroskopii.



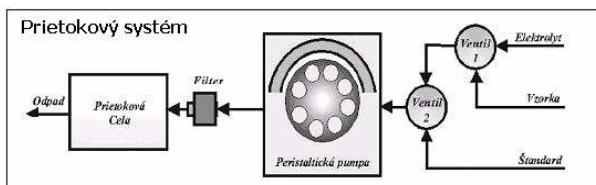
V úvode prednášateľ priblížil posluchácom históriu atómovej (absorpčnej) spektrometrie (A(A)S) a elektrochémie, resp. elektrochemickej analýzy, pričom pripomenal mená priekopníkov, ako boli Isaac Newton, Gustav Kirchhoff, Robert Bunsen, Alan Walsh, Luigi Galvani, Alexander Volta, Michael Faraday, Jaroslav Heyrovský a Dionýz Ilkovič.



V ďalšej časti porovnal parametre oboch analytických metód (počet stanoviteľných prvkov, medza stanovenia, koncentračný

rozsah, selektivita, interferencie, robustnosť, spoľahlivosť, aplikovateľnosť, pracnosť, rýchlosť, možnosť automatizácie, cenová náročnosť) a poukázal na ich výhody a nevýhody.

Obe metódy hrajú dôležitú úlohu v chemickej analýze rôznych materiálov. V tomto smere je výhodnejšie hľadať ich prienik, ako ich dávať do priameho konkurenčného postavenia. Dobrým príkladom synergického efektu z ich spájania je elektrochemická úprava vzoriek, t.j. elektrochemická separácia, prekoncentrácia a depozícia analytu a elektrochemické generovanie hydridov, použité najčastejšie v prietokovom systéme v kombinácii s AS. Uvedené techniky boli prezentované v mnohých aplikáciach (stanovenie Mn a As, prekoncentrácia a špeciačná analýza Cr a Se).



Metódy AS sú vo všeobecnosti vhodnejšie pre laboratórne analýzy väčšieho počtu vzoriek a na stanovenie obsahu kovov a polokovov. Elektrochemické metódy sú naopak výhodnejšie pri stanovení niektorých polokovov (As, Se, Sb), nekovov a organických látok, pri analýze vzoriek s vysokým obsahom solí, v procesnej analytike a skríningu. Príspevok elektrochémie k metódam atómovej spektrometrie možno stručne opísat' v niekoľkých bodoch:

- zvýšenie dôkazuschopnosti
- zníženie rušivých vplyvov
- jednoduchšia tvorba hydridov
- komplementárna metóda
- ekonomická alternatíva pre analýzu malého počtu vzoriek

Peter Matúš
Foto: Peter Matúš (1)
Poznámka: V článku boli použité obrázky z danej prednášky.

XXXX. HYDROCHÉMIA 2012
NOVÉ ANALYTICKÉ METÓDY V
CHÉMII VODY
16.-17. máj 2012
Bratislava
<http://www.vuvh.sk>

V dňoch 16.-17. mája 2012 sa v Bratislave konal jubilejný 40. ročník konferencie s medzinárodnou účasťou HYDROCHÉMIA 2012 – Nové analytické metódy v chémii vody. Podujatie sa uskutočnilo už tradične pod záštitou Výskumného ústavu vodného hospodárstva v Bratislave v spolupráci s Ministerstvom životného prostredia SR, Združením zamestnávateľov vo vodnom hospodárstve na Slovensku, Slovenskou vodohospodárskou spoločnosťou, Československou asociácií vodárenských expertov, Zväzom slovenských vedeckotechnických spoločností a Slovenským národným komitétom IWA. Za obdobie 40 ročníkov, vrátane tohtoročného, prezentovalo svoje práce dovedna 678 autorov a spoluautorov, bolo prednesených 982 prednášok a posterov, ktoré v zborníkoch reprezentuje 13 555 strán textu. Všetky uvedené číselné informácie len potvrdzujú prestíž a veľkú tradíciu tohto podujatia na Slovensku.

Hlavným cieľom konferencie bolo vytvoriť priestor pre prezentáciu najnovších poznatkov v oblasti analytiky vód a hydrochémie v Slovenskej a Českej republike a tiež umožniť osobné stretnutia účastníkov konferencie, spojené s vytvorením kontaktov pri vzájomnej výmene skúseností a podnetných myšlienok. Tématicky sa konferencia venovala problematike hydrochémie vo vzťahu k legislatíve EÚ, vývoju analytických metód v hydrochémii a ich aplikácií v praxi, problematike akreditácie vodohospodárskych laboratórií a medzilaboratórnych testov ako aj uplatneniu hydrochemických procesov pri úprave vód a čistení odpadových vód.

Počas odborného programu konferencie odznelo 30 vyzvaných a plenárnych prednášok a boli predstavené 4 postery. Z množstva zaujímavých prezentovaných príspevkov si dovolím uviesť 2 prednášky,

zamerané na využitie metódy atómovej spektrometrie v analýze vód:

- L. Macháčková, M. Žemberyová: Možnosti využitia kombinácie techník úpravy vzorky s metódami atómovej spektrometrie v oblasti stopovej analýzy toxickejch prvkov v prírodných vodách
- A. Manová, E. Beinrohr, F. Čacho, M. Kroliak: Stanovenie hydridotvorných prvkov vo vodách ich elektrochemickým generovaním

Organizátori tiež pripravili krátke spoločenské posedenie, spojené s výmenou skúseností a praktických poznatkov z oblasti hydrochemickej praxe ako aj s voľnou diskusiou, ktorá bola v mnohých prípadoch určite zdrojom nových poznatkov a námetov pre ďalší výzkum. Prezentované príspevky účastníkov boli publikované v recenzovanom Zborníku prednášok zo XXXX. ročníka konferencie s medzinárodnou účasťou Nové analytické metódy v chémii vody HYDROCHÉMIA 2012 (ISBN 978-80-89062-86-7).

SLOVENSKÁ VODOHOSPADÁRSKA SPOLOČNOSŤ ČLEN ZS VTS
PRI VÝSKUMNOM ÚSTAVU VODNEHO HOSPODÁRSTVA
VÝSKUMNÝ ÚSTAV VODNEHO HOSPODÁRSTVA BRATISLAVA
MINISTERSTVO ŽIVOTNEHO PROSTREDIA SR
ZDRUŽENIE ZAMESTNANOVATEĽOV VODNODOM HOSPODÁRSTVE
NA SLOVENSKU
SLOVENSKÁ VODOHOSPADÁRSKA SPOLOČNOSŤ ZS VTS
ČESKOSLOVENSKÁ ASOCIÁCIA VODÁRENSKÝCH EXPERTOV
ZVĀZ SLOVENSKÝCH VEDEKOTECHNICKÝCH SPOLOČNOSTÍ
SLOVENSKÝ NÁRODNÝ KOMITÉT IWA

ZBORNÍK PREDNÁŠOK ZO XXXX. ROČNÍKA
KONFERENCIE S MEDZINÁRODNUÚ ĚASŤOU

"NOVÉ ANALYTICKÉ METÓDY V CHÉMII VODY"

HYDROCHÉMIA 2012



GENERÁLNY PARTNER KONFERENCIE



MEDIÁLNI PARTNERI KONFERENCIE

Vodohospodársky Správodač

vodný hospodárství

Mediálny partner

Veľkým prekvapením celého podujatia bol CD nosič, obsahujúci všetky doposiaľ vydané zborníky príspevkov ako aj autorský a vecný register od roku 1964, ktorý dostal každý účastník konferencie. Za trpezzlivú prácu a nezlomné presvedčenie pripraviť toto CD patrí organizátorom srdečná vdaka.

*Lenka Macháčková
Poznámka: V článku bol použitý obrázok z danej konferencie*

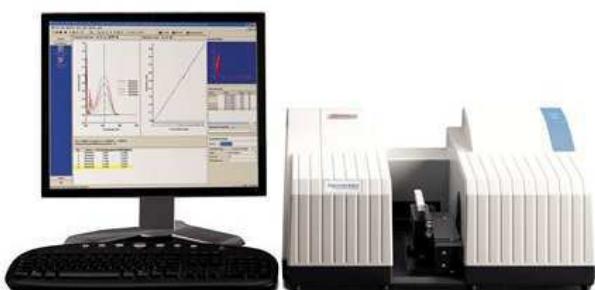
**DNI NOVEJ LABORATÓRNEJ
TECHNIKY**
29. máj 2012
Bratislava
<http://www.pragolab.sk>

29. mája 2012 sa v bratislavskom hoteli SOREA Regia uskutočnil odborný seminár, organizovaný spoločnosťami Thermo Fisher Scientific, Inc. a PRAGOLAB, s.r.o. v spolupráci so SSS, zameraný na praktické zoznámenie sa s prístrojmi firmy Thermo Fisher Scientific a možnosťami ich aplikácií. Na seminári sa zúčastnilo cca 130 odborníkov z výskumných inštitúcií, verejného a súkromného sektoru, priemyslu a rôznych laboratórií.



Prednášateľmi boli 8 pracovníci organizujúcich firiem:

- Erich Heiden, Thermo Fisher Scientific
- Burkhard Stehl, Thermo Fisher Scientific
- Michal Godula, Thermo Fisher Scientific
- Michaela Scigelová, Thermo Fisher Scientific
- Mariana Danková, PRAGOLAB
- Ivana Vaverková, Thermo Fisher Scientific
- Kamil Petrus, PRAGOLAB
- Petr Verner, Thermo Fisher Scientific



Oficiálny program seminára, ktorý sa s podobnou náplňou konal aj v Brne a Prahe, obsahoval okrem prestávky s občerstvením, obeda a workshopu pri prístrojoch nasledujúce prednášky:

- E. Heiden: UV-VIS spektrometre rady 200
- B. Stehl: Od AAS k ICP-OES a ICP-MS
- B. Stehl: Nová generácia ICP-MS – iCAP-Q
- M. Danková: High-End FTIR spektrometre – Thermo Nicolet iS50
- I. Vaverková: Spotrebny materiál – revolučné novinky 2012
- M. Danková: Nová éra GC Trace 1300/1310
- K. Petrus: Nový trojity kvadrupól TSQ 8000 pre plynovú chromatografiu
- P. Verner: Novinky v LC-MS
- M. Godula: *Návod pro hledání jehly v kupce sena: využití HRAM v analýze potravin*
- M. Scigelová: *Vybrané aplikace Orbitrapu QExactive v metabolomice, proteomice a klinické a toxikologické analýze*



Peter Matúš
Poznámka: V článku boli použité obrázky z daného seminára

PRIPRAVOVANÉ ODBORNÉ AKCIE

SLOVENSKO A ČESKÁ REPUBLIKA

13. ročník Školy hmotnostní spektrometrie

2.-7. září 2012

Srní v Kašperských horách, Šumava, ČR

<http://www.spektroskopie.cz/skolams>

13. ročník Školy hmotnostní spektrometrie pořádaný Spektroskopickou společností Jana Marka Marci a Katedrou analytické chemie Univerzity Pardubice se uskuteční ve dnech 2.-7. 9. 2012. Škola MS se bude konat v Srní v Kašperských horách na Šumavě stejně jako v loňském roce. Hotel Srní a jeho sousední depandance hotel Šumava leží přímo v srdci Národního parku Šumava a disponuje širokým spektrem kvalitních konferenčních služeb. Hlavním tématem letošního ročníku jsou novinky a trendy v hmotnostní spektrometrii a spojení se separačními technikami. Na základě zájmu účastníků v předchozích letech je program doplněn řadou prakticky zaměřených sekcí pro vybrané aplikace hmotnostní spektrometrie v (bio)analytické chemii. Novinkou je posun začátku odborného programu již na neděli odpoledne. V rámci Školy MS bude předána Cena Vladimíra Hanuše a Petra Sedmery za hmotnostní spektrometrii zástupci firmy HPST jako sponzora soutěže pro rok 2012. V letošní roce přislíbili plenární přednášku 3 špičkoví zahraniční lektori: Dr. Aleš Svatoš z Max Planck Institute for Chemical Ecology v Jeně bude přednášet o vztahu mezi biologií a hmotnostní spektrometrií, Dr. Davy Guillarme z University of Geneva ve Švýcarsku bude prezentovat přednášku o novinkách v oblasti spojení UHPLC/MS a farmaceutických aplikacích, a Dr. Reinaldo Almeida z Německa se bude zabývat novými

možnostmi využití nanoelektrospreje v metabolické analýze. Celkem je v programu plánováno více než 50 přednášek ve 13 sekcích prezentovaných 28 lektory, takže každý by si měl najít téma podle svého zájmu.

Registrace probíhá výhradně online na webových stránkách Školy MS: <http://www.spektroskopie.cz/skolams>

kde je také předběžný program a veškeré organizační informace, které jsou průběžně aktualizovány a doplňovány. Včasná registrace s platbou registračního poplatku nejpozději do 1. 7. 2012 je finančně zvýhodněna. Při registraci na konferenci obdrží každý účastník sborník obsahující plné verze prezentovaných přednášek. Pro začátečníky či méně pokročilé nabízíme možnost účasti na nedělním předkonferenčním přípravném kurzu v trvání celkem 6 hodin, kde bude možné získat nebo si zopakovat základy hmotnostní spektrometrie.

Je již zavedenou tradicí, že odborný program doplňuje bohatý společenský a sportovní program. Díky významné finanční podpoře hlavních firem v oboru hmotnostní spektrometrie je možné pro všechny účastníky uspořádat každý večer společenský program s rautem v následujícím pořadí: neděle (HPST), pondělí (Bruker Daltonics), úterý (Thermo Fisher Scientific), středa (Waters) a čtvrtok (AB SCIEX). Tradiční středeční sportovně kulturní dopoledne s nabídkou 5 různých variant programu bude sponzorováno firmou LECO.

*Prof. Ing. Michal Holčapek, Ph.D.
předseda organizačního a vědeckého výboru
13. Školy MS*

Mössbauer Spectroscopy in Materials Science 2012

11-15 June 2012

Olomouc, Czech Republic

<http://msms2012.upol.cz>

64. SJEZD ČESKÝCH A SLOVENSKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

25.-27. červen 2012

Univerzita Palackého, Olomouc, ČR

<http://www.64sjezd.upol.cz>

Rentgenfluorescenční spektrometrie

26.-28. červen 2012

Pardubice, ČR

<http://www.spektroskopie.cz>

RADIOANALYTICKÉ METODY IAA '12

27.-28. červen 2012

Katedra jaderných reaktorů FJFI ČVUT v areálu Matematicko-fyzikální fakulty UK, Praha, ČR

<http://www.spektroskopie.cz>

4th EuCheMS Chemistry Congress

26-30 August 2012

Prague Congress Centre, Prague, Czech Republic

<http://euchems-prague2012.cz/>

12th International Nutrition & Diagnostics Conference

27-30 August 2012

Carolinum – Charles University, Prague, Czech Republic

<http://www.indc.cz>

22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy

04-08 September 2012

Prague, Czech Republic

<http://www.chem.uni-wuppertal.de/conference>

Workshop on X-ray micro computed tomography (μ CT)

11-13 September 2012

Brno, Czech Republic

<http://www.ceitec.vutbr.cz>

European Symposium on Atomic Spectrometry ESAS 2012 - XXth Slovak-Czech Spectroscopic Conference

07-12 October 2012

Grandhotel Praha, Tatranská Lomnica, High Tatras

<http://www.spektroskopia.sk/esas-scsc>

2. podzimní škola rentgenové mikroanalýzy

22.-25. říjen 2012

Hotel Jehla, Žďár nad Sázavou, ČR

<http://www.spektroskopie.cz>

ZAHRANIČIE

21st International Conference on Spectral Line Shapes

03-09 June 2012

St. Petersburg, Russia

<http://icsls21.spbu.ru>

6th Nordic Conference on Plasma Spectrochemistry

10-13 June 2012

Loen, Norway

<http://www.nordicplasma.com>

Xth International Conference on Raman Spectroscopy Applied to the Earth and Planetary Sciences

11-13 June 2012

Nancy, France

<http://georaman10.uhp-nancy.fr>

7th International Conference Interfaces Against Pollution

11-14 June 2012

Nancy, France

<http://www.iap2012.fr>

International Multidisciplinary Scientific GeoConference & EXPO – SGEM

17-23 June 2012

Albena, Bulgaria

<http://www.sgem.org>

International Symposium on Metal Complexes 2012 and XXIII Italian-Spanish Congress on Thermodynamics of Metal Complexes

18-22 June 2012

Lisbon, Portugal

<http://ismec2012.ist.utl.pt>

European Conference on X-Ray Spectrometry

18-22 June 2012

Vienna, Austria

<http://www.ati.ac.at/EXRS2012>

35th World Congress of Vine and Wine

18-22 June 2012

Izmir Turkey

<http://www.oiv2012.org.tr>

11th European Workshop on Laser Ablation

19-22 June 2012

Gijón, Spain

<http://www.unioviedo.es/workshoplaicpm/CongresoLA1350/home.htm>

13th International Symposium on Biological and Environmental Reference Materials

25-29 June 2012

Vienna, Austria

<http://www-pub.iaea.org/MTCD/Meetings/Announcement.s.asp?ConfID=41983>

11th International Conference on the Applications of Magnetic Resonance in Food 2012

26-29 June 2012

Wageningen, Netherlands

<http://www.mrfood2012.com>

EUROMAR 2012

01-05 July 2012

Dublin, Ireland

<http://euromar2012.org>

XVII Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy

02-07 July 2012

Zelenogorsk, Russia

<http://symp.iao.ru/en/hrms/17/il>

11th European Conference On Nonlinear Optical Spectroscopy and 31st European CARS Workshop

08-11 July 2012

Aberdeen, United Kingdom

www.abdn.ac.uk/econos2012

11th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation

09-13 July 2012

Lyon, France

The 4th International Congress on Arsenic in the Environment

22-27 July 2012

Cairns, Australia

<http://www.as2012.com.au>

In Vivo Magnetic Resonance

29 July - 03 August 2012

Waterville, USA

<http://www.grc.org/programs.aspx?year=2012&program=invivomag>

Gordon Research Conference on Vibrational Spectroscopy

05-10 August 2012

Biddeford, USA

<http://www.grc.org/programs.aspx?year=2012&program=vibrspec>

61st Annual Denver X-ray Conference

06-10 August 2012

Denver, USA

<http://www.dxcicdd.com>

23rd International Conference on Raman Spectroscopy

12-17 August 2012

Bangalore, India

www.icors2012.org

International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems

19-24 August 2012

Lyon, France

<http://www2.biochem.wisc.edu/icmrbs>

2012 Asia-Pacific Winter Conference on Plasma Spectrochemistry

26-29 August 2012

Jeju Island, South Korea

<http://apwc2012.dankook.ac.kr>

31st European Congress of Molecular Spectroscopy

26-31 August 2012

Cluj-Napoca, Romania

www.phys.ubbcluj.ro/eucmos2012

International Symposium on the Industrial Applications of the Mössbauer Effect

02-07 September 2012

Dalian, China

<http://www.conferencenet.org/conference/isiam/e.html>

29th International Symposium on Chromatography
09-13 September 2012
Torun, Poland
<http://en.isc2012.pl>

19th International Mass Spectrometry Conference
15-21 September 2012
Kyoto, Japan
<http://www.imsc2012.jp>

8th Aegean Analytical Chemistry Days
16-20 September 2012
IZTECH campus, Izmir, Turkey
<http://aacd2012.iyte.edu.tr/index.php>

24th International Ion Chromatography Symposium
17-20 September 2012
Berlin, Germany
<https://m360.casss.org/frontend/event.aspx?EventId=37923>

12th Rio Symposium on Atomic Spectrometry
17-21 September 2012
Cataratas do Iguaçu, Brazil
<http://www.12thriosymposium.com.br>

1st International Congress on Analytical Chemistry (RO-ICAC 2012)
18-21 September
Targoviste, Romania
<http://www.icstm.ro/ICAC2012>

16th International Conference on Heavy Metals in the Environment
23-27 September 2012
Rome, Italy
<http://ichmet16.iaa.cnr.it>

12th International Conference on Flow Analysis
23-28 September 2012
Thessaloniki, Greece
<http://flowanalysis12.web.auth.gr> Barcelona, Spain
www.ub.edu/IRUG10BCN

29th LC/MS Montreux Symposium
7-9 November, 2012
Montreux, Switzerland
<http://www.lcms-montreux.com/>

European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry
10-15 February, 2013
Krakow, Poland
<http://www.chemia.uj.edu.pl/ewcps>

NOVÉ KNIHY

Laser-Induced Breakdown Spectroscopy: Fundamentals and Applications
Reinhard Noll
Springer, 2012, 555 p.
ISBN 3642206670

Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy, Second Edition: A Problem-Based Approach
Jeffrey H. Simpson
Academic Press, 2012, 540 p.
ISBN 0123849705

Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS V: Proceedings of the Fifth International Conference, Washington, DC, September 30 - October 4, 1985

Alfred Benninghoven, Richard J. Colton, David S. Simons and Helmut W. Werner (Eds.)
Springer, 2012, 592 p.
ISBN 3642827268

Spectroscopic Measurement
Mark Linne
Academic Press, 2012, 268 p.
ASIN: B0089NV5D6

Flow Analysis with Spectrophotometric and Luminometric Detection

Elias Ayres Guidetti Zagatto, Claudio C. Oliveira, Alan Townshend and Paul Worsfold
Elsevier, 2012, 472 p.
ISBN 0123859247

Hybrid Approaches to the Structural Biology of Macromolecular Complexes

Alasdair C. Steven
Royal Society of Chemistry, 2012, 300 p.
ISBN 1849730105

Dynamic Force Spectroscopy and Biomolecular Recognition

Anna Rita Bizzarri, Salvatore Cannistraro (Eds.)
CRC Press, 2012, 270 p.
ISBN 1439862370

Mass Spectrometry in Polymer Chemistry

Christopher Barner-Kowollik, Till Gruendlung, Jana Falkenhagen and Steffen Weidner (Eds.)
Wiley-VCH, 2012, 500 p.
ISBN 3527329242

Infrared and Raman Spectroscopy in Forensic Science

John M. Chalmers, Howell G. M. Edwards and Michael D. Hargreaves (Eds.)
Wiley, 2012, 646 p.
ASIN B006V87AA8

Rapid Characterization of Microorganisms by Mass Spectrometry

Catherine Fenselau and Plamen Demirev (Eds.)
American Chemical Society, 2012, 246 p.
ISBN 0841226121

Electron Spectroscopy for Surface Analysis

H. Ibach, J.D. Carette, B. Feuerbacher, B. Fitton, H. Froitzheim, M. Henzler, J. Kirschner, D. Roy
Springer, 2012, 276 p.
ISBN 3642811019

Raman Spectroscopy and its Application in Nanostructures

Shu-Lin Zhang
Wiley, 2012, 500 p.
ASIN B0072M0URW

High Resolution NMR Spectroscopy in Solids (NMR Basic Principles and Progress)

M. Mehring
Springer, 2012, 264 p.
ISBN 364296334X

UV-VIS Spectroscopy and Its Applications

Heinz-Helmut Perkampus, H.C. Grinter and T.L. Threlfall
Springer, 2012, 260 p.
ISBN 3642774792

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy of Cement-Based Materials

Pierre Colombet, Arnd-Rüdiger Grimmer, Helene Zanni and Piero Sozzani (Eds.)
Springer, 2012, 446 p.
ISBN 3642804349

X-Ray Fluorescence Spectrometry (XRF) in Geoarchaeology

M. Steven Shackley (Ed.)
Springer, 2012, 245 p.
ISBN 1461436206

NMR in Medicine and Biology: Structure Determination, Tomography, In Vivo Spectroscopy

Karl H. Hausser and Hans R. Kalbitzer
Springer, 2012, 233 p.
ISBN 3642761062

Introduction to Plasma Spectroscopy

Hans-Joachim Kunze (Feb 25, 2012)
Springer, 2012, 254 p.
ISBN 3642260713

Vibrational Spectroscopy: Chemistry and Polymer Science

Robert J Meier and Neil W Barnett
Royal Society of Chemistry, 2012, 300 p.
ISBN 1847559123

Fluorescence Spectroscopy of Biomacromolecules: Brief Handbook in Biological Fluorescence

Nikolai Vekshin
LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012, 200 p.
ISBN 3847335405

Reflectance Spectroscopy: Principles, Methods, Applications
Gustav Kortüm and James E. Lohr
Springer, 2012, 376 p.
ISBN 3642880738

Circular Dichroism: Theory and Spectroscopy
David S. Rodgers (Ed.)
Nova Science, 2012, 500 p.
ISBN 1611225221

Comprehensive Environmental Mass Spectrometry
Albert T. Lebedev
ILM Publications, 2012, 544 p.
ISBN 1906799121

Fourier Transform Infrared Spectroscopy in Food Microbiology
Avelino Alvarez-Ordóñez and Miguel Prieto
Springer, 2012, 61 p.
ISBN 1461438128

Mass Spectrometry Handbook
Mike S. Lee (Ed.)
Wiley, 2012, 1368 p.
ISBN 047053673X

Spectroscopic Methods of Analysis: Methods and Protocols
Wlodek M. Bujalowski (Ed.)
Humana Press, 2012, 409 p.
ISBN 1617798053

Internal Reflection and ATR Spectroscopy
Milan Milosevic
Wiley, 2012, 264 p.
ISBN 0470278323

Chemometrics in Spectroscopy
Howard Mark and Jerry Workman
Academic Press, 2012, 558 p.
ASIN: B0089NW20Q

SPOLOČENSKÁ RUBRIKA

Významné životné jubileá členov Slovenskej spektroskopickej spoločnosti v roku 2012

Päťdesiatroční jubilanti

Ing. Dalibor Čontoš
Ing. Rudolf Balla
Ing. Tat'ana Čepel'ová
RNDr. Ladislav Rožek, MBA

Päťdesiatpäťroční jubilanti

Ing. Fabrício Jakubec
RNDr. Helena Ondíková
Ľubomíra Koščová

Šestdesiatroční jubilanti

Ing. Ladislav Náměstek
Ing. František Jonáš

Šestdesiatpäťroční jubilanti

doc. RNDr. Gabriela Holéczyová, CSc.

V mene SSS všetkým jubilantom srdečne blahoželáme a do ďalších rokov želáme veľa zdravia a tvorivých súl.

Redakčná rada Spravodaja SSS

OZNAMY, PONUKY, POŽIADAVKY

ČLENSKÉ POPLATKY

Členský poplatok za rok 2012 vo výške 5 EUR pre individuálnych členov alebo vo výške 50 EUR pre kolektívnych členov, prosím, uhradťte na účet Poštovej banky v Bratislave, exp. Karlova Ves, č. ú.: **20096353**, kód banky: **6500**. V poznámke pre príjemcu **nezabudnite uviesť svoje meno a názov organizácie**.

Ďalej prosíme členov, ktorí ešte nezaplatili členské za predchádzajúce roky, aby tak urobili čo najskôr.

Ďakujeme.

Hlavný výbor SSS

LITERATÚRA

Slovenská spektroskopická spoločnosť ponúka na predaj:

1. J. Dědina, M. Fara, D. Kolihová, J. Korečková, J. Musil, E. Plško, V. Sychra: Vybrané metody analytické atomové spektrometrie, ČSSS, Praha, 1987
2. M. Hoenig, A.M. de Kersabie: Ako zabezpečiť kvalitu výsledkov v atómovej absorpcnej spektrometrii s elektrotermickou atomizáciou?, SSS, Bratislava, 1999
3. E. Krakovská (Ed.): Contemporary State, Development and Applications of Spectroscopic Methods (Proceedings of 4th European Furnace Symposium and XVth Slovak Spectroscopic Conference), VIENALA, Košice, 2000
4. E. Krakovská, H.-M. Kuss: Rozklady v analytickej chémii, VIENALA, Košice, 2001
5. J. Kubová, I. Hagarová (Eds.): Book of Abstracts (XVIIIth Slovak Spectroscopic Conference), Comenius University, Bratislava, 2006
6. J. Kubová (Ed.): A special issue of Transactions of the Universities of Košice, 3, 2008 (Proceedings of XIXth Slovak-Czech Spectroscopic Conference), Technical University, Košice, 2008
7. M. Bujdoš, P. Diviš, H. Dočekalová, M. Fišera, I. Hagarová, J. Kubová, J. Machát, P. Matúš, J. Medved', D. Remeteiová, E. Vitoulová: Špeciácia, špeciačná analýza a frakcionácia chemických prvkov v životnom prostredí, Univerzita Komenského, Bratislava, 2008
8. J. Kubová, M. Bujdoš (Eds.): Book of Abstracts (XIXth Slovak-Czech Spectroscopic Conference), Comenius University, Bratislava, 2008
9. J. Kubová (Ed.): A special issue of Transactions of the Universities of Košice, 3, 2008 (Proceedings of XIXth Slovak-Czech Spectroscopic Conference), Technical University, Košice, 2008
10. K. Flórián, H. Fialová, B. Palaščáková (Eds.): Zborník (Výberový seminár o atómovej spektroskopii), Technická univerzita, Košice, 2010

Cena publikácií č. 1-3, 5, 6, 8, 9, 10: 5 EUR + balné a poštovné

Cena publikácií č. 4, 7: 10 EUR + balné a poštovné

PRÍSTROJE A CHEMIKÁLIE

Prístrojová komisia SSS si dovoľuje požiadat' všetky pracoviská, na ktorých sa nachádza prebytočná laboratórna technika (najmä spektrometre – funkčné i nefunkčné), resp.

prebytočné zásoby chemikálií, aby ich prostredníctvom našej komisie ponúkli iným pracoviskám.

Výskumný ústav po likvidácii laboratórií ponúka výhodný predaj klasicky vyhrievaných grafitových kyvetiek s pyrolytickou vrstvou pre AAS Perlin-Elmer (zľava 25%).

Pán Poláček, telefón: 02/64362095

Laborkonzorcium, Dr. Marian Polák, Krížna 52, Bratislava, telefón: 02/55577325, mobil: 0903 412 868

Geologický ústav PRIF UK odkúpi za zostatkovú cenu staršie modely AAS spektrometrov Perkin-Elmer (napr. 5000, 4100, 3030, 1100) a EDL lampy (Systém 1 a 2).

GÚ PRIF UK, Mlynská dolina 1, 842 15 Bratislava 4

Telefón: 02/60296290, E-mail: matus@fns.uniba.sk

SÚŤAŽ

SLOVENSKÁ SPEKTROSKOPICKÁ SPOLOČNOSŤ

vyhlasuje na roky 2011 a 2012

8. ročník Súťaže vedeckých prác mladých spektroskopikov

Do súťaže môže byť poslaná práca alebo súbor prác autora, ktorý v príslušnom roku 2011/2012 nepresiahne vek 35 rokov. Práce alebo súbory prác treba poslat' na adresu SSS do 10. septembra 2012. Akceptované sú práce, ktoré boli publikované alebo prijaté redakčnou radou niektorého impaktovaného vedeckého časopisu. V prípade spoluautorstva sa žiada čestné prehlásenie autora o jeho podiele na publikácii. Okrem uznania a

spoločenského ocenia je súťaž aj finančne dotovaná z prostriedkov SSS. Oceneným autorom bude naviac udelené aj jednorocné členstvo v SSS. Výsledky vyhodnotenia súťaže budú vyhlásené na príslušnom odbornom podujatí v roku 2012 a zverejnené v Spravodaji SSS.

Jana Kubová

INZERCIA

Využite možnosť výhodnej inzercie v Spravodaji Slovenskej spektroskopickej spoločnosti!

Cenník inzercie v Spravodaji SSS

Formát	Cena/EUR
jedna strana (A4)	100
polovica strany (A5)	75
štvrtina strany (A6)	50

Spravodaj SSS je vedecký časopis zameraný na výskum a vzdelávanie v oblasti spektroskopie a spektrometrie na Slovensku.

Spravodaj SSS vydáva Slovenská spektroskopická spoločnosť, člen Zväzu slovenských vedecko-technických spoločností. Vychádza v slovenskom, českom alebo anglickom jazyku dvakrát ročne.

Adresa redakcie:

GU PRIF UK, Mlynská dolina 1, 842 15 Bratislava 4
tel. č.: 02/60296290, e -mail: sss@spektroskopia.sk
<http://www.spektroskopia.sk>

Redakčná rada:

doc. Ing. Miroslav Fišera, CSc.
prof. Ing. Karol Flórián, DrSc.
doc. Ing. Alžbeta Hegedűsová, CSc.
doc. RNDr. Jana Kubová, PhD.; predsedníčka
RNDr. Peter Matúš, PhD.; zodpovedný redaktor
Ing. Monika Ursínyová, PhD.
doc. Ing. Viera Vojteková, PhD.

Redakčná úprava: RNDr. Peter Matúš, PhD.

ISSN 1338-0656