



SPRAVODAJ

Slovenskej spektroskopickej spoločnosti
člena Zväzu slovenských vedecko-technických spoločností



ISSN 1338-0656

Ročník 30, Číslo 1, 2023

Generálni sponzori Slovenskej spektroskopickej spoločnosti



1993 - 2023

Milé kolegyně, milí kolegovia,
v novom čísle jubilejného 30. ročníka Spravodaja SSS nájdete o.i. dva články: prvý o pokrokoch v Mössbauerovej spektrometrii pri štúdiu železa v komplexných systémoch, druhý o kritickom pohľade na využívanie sekvenčných extrakcií vo frakcionácii rizikových prvkov vs. priamej spektroskopickej analýzy tuhých materiálov. V dňoch 15.-31. 12. 2022 prebehli na webovej stránke SSS elektronické voľby 7 členov nového Hlavného výboru SSS pre funkčné obdobie 2023-2025 zo 48 kandidátov (členov SSS). Výsledky volieb (v abecednom poradí) boli zverejnené na webovej stránke SSS dňa 18. 01. 2023:

- RNDr. Ingrid Hagarová, PhD.; Univerzita Komenského v Bratislave
- doc. RNDr. Peter Matúš, PhD.; Univerzita Komenského v Bratislave
- prof. Ing. Marcel Miglierini, DrSc.; Slovenská technická univerzita v Bratislave
- doc. Ing. Dagmar Remeteiová, PhD.; Technická univerzita v Košiciach
- doc. RNDr. Silvia Ružičková, PhD.; Technická univerzita v Košiciach
- doc. RNDr. Martin Urík, PhD.; Univerzita Komenského v Bratislave

- doc. Ing. Viera Vojteková, PhD.; Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach

V dňoch 09.-17. 01. 2023 bolo *per rollam* hlasovaním (cez e-mail) jednomyselne zvolené staronové Predsedníctvo Hlavného výboru SSS (predseda a dvaja miestopredsedia) pre funkčné obdobie 2023-2025. Výsledky boli zverejnené na webovej stránke SSS dňa 18. 01. 2023:

- Predseda: prof. Ing. Marcel Miglierini, DrSc.
- 1. Miestopredseda a vedecký tajomník: RNDr. Ingrid Hagarová, PhD.
- 2. Miestopredseda, organizačný tajomník a hospodár: doc. RNDr. Peter Matúš, PhD.

Zvoleným členom Hlavného výboru SSS a jeho Predsedníctva v mene Redakčnej rady Spravodaja srdečne blahoželám!

A v neposlednom rade si dovoľujem upozorniť, že v roku 2023 si SSS pripomína 30. výročie svojho založenia (1993) ako nástupníckej organizácie po bývalej Československej spektroskopickej spoločnosti na Slovensku po rozdelení spoločnej republiky.

Peter Matúš

PODÍVEJTE SE NA SVĚT NAŠÍ OPTIKOU



DLOUHÁ ŽIVOTNOST | ŠPIČKOVÝ VÝKON | ŠIROKÁ NABÍDKA PŘÍSLUŠENSTVÍ | JEDNODUCHÉ OVLÁDÁNÍ

FT-IR spektrometry

ALPHA II

- Kompaktní spektrometr pro rutinní analýzu i výzkum
- Široká škála měřicích modulů

INVENIO | VERTEX série

- Nejvýkonnější výzkumné spektrometry na trhu
- Propojení s mikroskopem, Ramanem, TGA, GC...
- Rozšíření spektrálního rozsahu od FIR/THz do VIS/UV oblasti



Ramanovy a FT-NIR spektrometry

BRAVO
ruční Raman



MPA II FT-NIR
spektrometr



MultIRAM | RAM II | BRAVO

- Univerzální stolní FT-Ramanovy spektrometry
- BRAVO je ruční Raman nové generace

MPA II | TANGO | MATRIX

- FT-NIR spektrometry pro nejrůznější QC/QA aplikace
- MATRIX je procesní FT-NIR spektrometr přímo do výroby

FT-IR a Ramanovy mikroskopy

HYPERION II | LUMOS II

- LUMOS II FT-IR mikroskop s vysokým stupněm automatizace a rychlým mapováním
- HYPERION je špičkový FTIR mikroskop umožňující QCL technologii pro nejrychlejší mapování a nejvyšší prostorové rozlišení.

SENTERRA II

- Kompaktní Ramanův mikroskop pro pohodlné mapování
- Umožňuje kombinaci až 4 laserů v rozmezí 1064-488 nm



SENTERRA II
mikroskop

FT-IR mikroskop LUMOS II

NA SPEKTROSKOPICKÚ TÉMU

POKROKY V MÖSSBAUEROVEJ SPEKTROMETRII PRI ŠTÚDIU ŽELEZA V KOMPLEXNÝCH SYSTÉMOCH

Silvia Vyhnáleková, Lenka Urbánová

Ústav laboratórneho výskumu geomateriálov,
Prírodovedecká fakulta, Univerzita
Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842
15 Bratislava
moravcova23@uniba.sk

Abstrakt

Mössbauerova spektrometria ako presný analytický nástroj pomáha pochopiť správanie železa, korózne mechanizmy a optimalizáciu materiálov, najmä v jadrovom priemysle a charakterizácii ocelí. V biologických tkanivách odhaľuje pohľad na štruktúrne a magnetické usporiadanie nanočastíc obsahujúcich železo. Okrem toho je táto metóda nápomocná pri štúdiách sorpcie, pričom poskytuje cenné informácie o lokálnom prostredí a koordinácii atómov zapojených do sorpčných procesov.

Kľúčové slová

Mössbauerova spektrometria, železo, sorpcia.

Úvod

Železo je jedným z najrozšírenejších prvkov na Zemi a jeho začlenenie do rôznych matric vedie k vývoju materiálov s jedinečnými a žiaducimi vlastnosťami. Vzorky obsahujúce železo zahŕňajú široké spektrum materiálov, od jednoduchých zliatin železa až po zložité nanoštruktúrne zlúčeniny, z ktorých každá má odlišné aplikácie v rôznych priemyselných odvetviach.

Jedna z najvýznamnejších aplikácií je v oblasti konštrukčných materiálov. Oceľ je zliatina zložená predovšetkým zo železa a je široko používaná v stavebníctve, automobilovom a leteckom priemysle vďaka svojej výnimočnej pevnosti a odolnosti. Okrem toho sú materiály na báze železa významné pri výrobe elektrických

komponentov, pričom využívajú svoju vynikajúcu elektrickú vodivosť.

V posledných rokoch sa vzorky obsahujúce železo dostali do popredia vo vznikajúcich oblastiach, ako sú nanotechnológia a biomedicína. Ich magnetické vlastnosti umožňujú presnú kontrolu a sledovanie v biologických systémoch, čo ukazuje všestrannosť materiálov na báze železa v špičkových technológiách.

Štúdium vzoriek obsahujúcich železo je navyše rozhodujúce pre pochopenie vplyvu prostredia na materiály a ich odolnosti voči korózii. Náchylnosť železa ku korózii viedla k rozsiahlemu výskumu ochranných náterov a povrchových úprav na zvýšenie životnosti rôznych štruktúr a komponentov.

Železo je kritickým prvkom vo vzorkách životného prostredia a jeho prítomnosť a koncentrácia v prírodných systémoch má hlboké dôsledky pre ekologické, geologické a environmentálne štúdie. Pochopenie distribúcie a správania železa vo vzorkách životného prostredia je nevyhnutné z rôznych dôvodov.

Železo je jednou z kľúčových zložiek (bio)geochemických cyklov, ako sú cykly uhlíka a dusíka. Dostupnosť železa v pôde tiež ovplyvňuje rast rastlín a rôzne ekosystémy. Prítomnosť a koncentrácia železa vo vzorkách životného prostredia môže slúžiť ako indikátor rôznych environmentálnych podmienok.

Zároveň sa vytvorilo množstvo spôsobov prípravy rôznych fáz oxidov a hydroxidov železa, ktoré umožňujú sofistikovanú kontrolu ich veľkosti, morfológických, štruktúrnych a magnetických aspektov.

V súčasnosti je známych 16 oxyhydroxidov a oxidov železa (Tab. 1), ktoré vo svojej štruktúre obsahujú železo v oxidačnom stupni (Fe^{2+}) a (Fe^{3+}) alebo zmes obidvoch kationov.

Mössbauerova spektrometria predstavuje všestranný a presný analytický nástroj, ktorý našiel cenné aplikácie pri štúdiu železa v rôznych kontextoch, od vzoriek z prostredia cez materiály jadrového priemyslu až po biologické tkanivá. Jeho veľká výhoda je založená na vysokej citlivosti voči jadrám železa a na

základe hyperjemných parametrov vieme určiť ich oxidačný stav, mineralogickú štruktúru ako aj usporiadanie ich kryštálovej

mriežky či možné defekty spôsobené interakciou v ich blízkom okolí.

Tab. 1. Prehľad oxyhydroxidov a oxidov železa

Oxyhydroxidy a hydroxidy	Oxidy
Goethit α -FeOOH	Hematit α -Fe ₂ O ₃
Akageneit β -FeOOH	β -Fe ₂ O ₃
Lepidocrocit γ -FeOOH	Maghemit γ -Fe ₂ O ₃
Schwertmannit Fe ₁₆ O ₁₆ (OH) _y (SO ₄) _z · n H ₂ O	ϵ -Fe ₂ O ₃
Feroxyhit δ -FeOOH	Magnetit Fe ₃ O ₄ (Fe ^{II} Fe ₂ ^{III} O ₄)
FeOOH (vysokotlaková forma pyritového typu)	Wüstit FeO
Ferrihydrit Fe ₅ HO ₈ · 4H ₂ O	
Bernalit Fe(OH) ₃	
Hydroxid železnatý Fe(OH) ₂	
Zelená hrdza Fe _x ^{III} Fe _y ^{II} (OH) _{3x+2y-z}	

Konstrukčné materiály

V jadrovom priemysle sú materiály obsahujúce železo neoddeliteľnou súčasťou reaktorov, palivových kaziet a konštrukčných prvkov. Mössbauerova spektrometria poskytuje nedeštruktívne prostriedky s vysokým rozlíšením na charakterizáciu oxidačných stavov a chemických väzieb v blízkom prostredí atómov železa v týchto materiáloch. Tieto informácie sú kľúčové pre pochopenie korózných mechanizmov, hodnotenie integrity komponentov reaktora a optimalizáciu materiálov na zvýšenie odolnosti voči žiareniu. Nehrdzavejúce ocele sú súčasťou technologicky dôležitých kovových zliatin, ktoré majú špeciálne vlastnosti, ako je odolnosť voči korózii, chemickým činidlám a žiareniu. Nedávne štúdie určili, ako dopingové prvky ovplyvňujú odolnosť ocelí voči korózii. Oceľ je zliatina, ktorá často obsahuje železo ako svoju primárnu zložku spolu s ďalšími prvkami, ako je uhlík, chróm, nikel a ďalšie. V priemyselných aplikáciách sa oceľ vo veľkej miere používa kvôli jej pevnosti, odolnosti a všestrannosti.

Mössbauerova spektrometria zohrala kľúčovú úlohu pri charakterizácii vzoriek ocele, najmä pri identifikácii magnetických a nemagnetických fáz a kvantifikácii ich vlastností. Skúmanie ocele LC200N pomocou Mössbauerovej spektrometrie a neutrónovej aktivačnej analýzy odhalilo variácie v zložení a magnetických vlastnostiach ocele za rôznych podmienok. Pozoruhodným zistením bola prítomnosť feromagnetických fáz vo

vzorke a výskyt dubletových paramagnetických signálov v leštenej vzorke. Štúdia naznačuje, že proces leštenia môže lokálne ovplyvniť magnetické charakteristiky ocele, čo prispieva k lepšiemu pochopeniu jej správania a potenciálnych aplikácií [1].

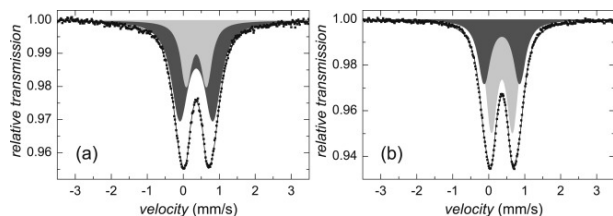
Táto metóda sa často využíva aj na štúdium lokálneho prostredia železa na povrchu a vo vnútri pri povrchových úpravách ocelí. V dôsledku termochemickej aktivácie pri povrchových úpravách vznikajú magnetické fázy [2].

Štúdium environmentálnych vzoriek

Mössbauerova spektrometria môže pomôcť pri identifikácii prítomnosti minerálov obsahujúcich železo vo vzorkách pôdy a pri charakterizácii ich minerálneho zloženia. Tieto informácie môžu byť cenné pre environmentálne štúdie, geológiu a pochopenie procesov, ktoré formujú zemský povrch.

Okrové materiály sú komplexné heterogénne zmesi rôznych minerálov, ktoré slúžia k imobilizácii kontaminantov v životnom prostredí. Vďaka identifikácii špecií železa a ich oxidačných stavov je možné určiť zloženie tejto geochemickej bariéry, v ktorej jednotlivé zložky vykazujú špecifické sorpčné vlastnosti. Tieto materiály typicky obsahujú vysoké koncentrácie železa vo forme oxidov a hydroxidov železa ako je hematit (α -Fe₂O₃), goethit (α -FeOOH) a magnetit (Fe₃O₄). V okrových materiáloch pochádzajúcich z banskej lokality bola potvrdená prítomnosť železa vo forme ferrihydritu a goethitu s nízkou kryštalinitou [3].

Podobne bola overená prítomnosť železa v oxidačnom stave (Fe^{3+}) v okroch po kultivácii a pred kultiváciou s mikroskopickými vláknitými hubami bežne sa vyskytujúcimi v pôdach, vid' Obr. 1. To naznačuje, že železnaté ióny extrahované vo vodnej forme z železitých fáz sú nahradené novovytvorenými železitými minerálmi, vrátane goethitu a ferrihydritu [4].

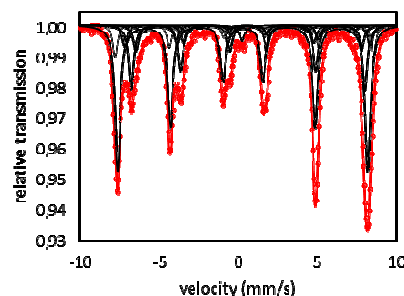


Obr. 1. Mössbauerove spektrá (a) okrov pred kultiváciou a (b) nerozpustených zvyškov okrov po kultivácii s *A. niger* pri izbovej teplote [4]

Pri nízkoteplotných (4,2 K) analýzach okrov Mössbauerove spektrum pozostávalo z troch sextetov, ktoré identifikujú prítomnosť goethitu, lepidokrokitu, ale aj akaganeitu. V dôsledku metabolickej aktivity mikroskopických vláknitých húb dochádza k transformáciám špecií železa, ktoré boli identifikované ako novovznikajúce sextety prislúchajúce hematitu a goethitu (α aj δ štruktúra) [5]. Podobne aj pri biolúhovaní hubou *Aspergillus niger*, s najväčšou pravdepodobnosťou dochádza k transformácii akaganeitu a ferrihydritu na goethit, ktorý patrí medzi najstabilnejšie oxyhydroxidy železa [6].

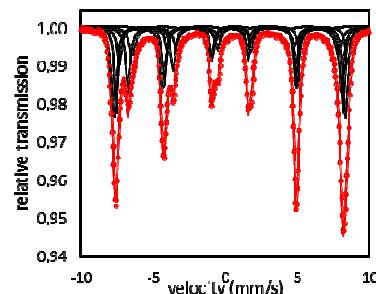
Na základe Mössbauerovej spektrometrie sme pre vzorku komerčne zakúpeného magnetitového nanoprášku identifikovali sextety, ktoré naznačujú nestechiometrický pomer železa. Očakávaný pomer 2:1 železa (III) v tetraedrickom usporiadaní magnetitu k železu (II) a železu (III) v oktaedrickom usporiadaní sa vo vzorke zmenil na približne 1,3:1, čo naznačuje posun smerom k železu v oktaedrickom usporiadaní (Obr. 2). Na základe hyperjemných parametrov sme potvrdili zloženie komerčne zakúpeného magnetitového nanoprášku. Magnetit tvorí 90 % vzorky, pričom maghemit tvorí minoritnú zložku (9 %). Zvyšné 1 % vykazuje zreteľnú centrálnu zložku v spektre, potenciálne spojenú so superparamagnetickými časticami s vysokou labilitou, nedetegovanými po

expozícii húb. Vo vodnom prostredí sa (nano)častice magnetitu často agregujú, čím sa znižuje ich sorpčná schopnosť. Dá sa to vyriešiť vhodnou stabilizačnou metódou. Kombinácia magnetitu s biomasou mikroskopicky vláknitých húb synergicky umožňuje prekonať tieto nevýhody.



Obr. 2. Mössbauerove spektrum magnetitového nanoprášku pri izbovej teplote

Mikroskopicky vláknitá huba *Aspergillus clavatus*, ktorá sa zvyčajne nevyskytuje v environmentálnych štúdiách stability minerálov, preukázala schopnosť deformovať kryštálovú mriežku magnetitového nanoprášku (Obr. 3).



Obr. 3. Mössbauerove spektrum zaznamenané 6. deň kultivácie *A. clavatus* inkubovaného v prítomnosti magnetitového nanoprášku pri izbovej teplote

Rozdiely pozorované v hyperjemných parametroch naznačujú, že *A. clavatus* vyvolal zmeny, vrátane deformácií mriežky, defektov a fázových prechodov. Štruktúrna zmena kryštálovej mriežky pozorovaná pri izbovej teplote naznačuje zvýšenú prítomnosť častíc s veľkosťou okolo 10 nm vo vzorke, pričom môže zvýšiť mernú plochu a zlepšiť sorpčné vlastnosti magnetitu v spracovanej biomase zvýšením dostupných sorpčných miest. V dôsledku toho sa potvrdila prítomnosť magnetitu (88 %) a prítomnosť maghemitu (12 %), pričom štruktúrne zmeny pre oktaédrické usporiadanie magnetitu predstavovali 15 %.

Štúdium biologických tkanív

Železo, nevyhnutný prvok pre život, hrá kľúčovú úlohu v rôznych biologických procesoch, vrátane transportu kyslíka, a oxidačno-redukčných reakciách. Nedostatok železa môže viesť ku kognitívnym zmenám a zmenám správania, zatiaľ čo nadbytok môže spustiť produkciu škodlivých voľných radikálov.

Pomocou Mössbauerovej spektrometrie bolo skúmané magnetické správanie železa v biologických tkanivách extrahovaných *post mortem* (ľudský mozog, ľudská a konská slezina). Pri izbovej teplote výsledky určujú dublety charakteristické pre nemagnetický materiál, ktorý môže byť pri izbovej teplote paramagnetický a/alebo mať superparamagnetické správanie nanočastíc obsahujúcich železo. Ďalšia analýza pri 4,2 K naznačuje posun k sextetom, čo naznačuje prítomnosť veľmi malých častíc s blokovacími teplotami pod 4,2 K [7].

Štúdiá identifikuje štrukturálne zložky v biologických tkanivách, ako je hematit, ferrihydrit, magnetit a/alebo maghemit. Napriek mierne odlišným hyperjemným parametrom zostávajú základné štruktúry konzistentné v rôznych biologických vzorkách. Výskum podčiarkuje potenciál Mössbauerovej spektrometrie pri poskytovaní informácií o lokálnych štrukturálnych a magnetických usporiadaniach nanočastíc železa v biologických tkanivách.

Spektá zvýraznili spoločné črty v analyzovaných biologických tkanivách s ohľadom na identifikáciu jednotlivých štrukturálnych komponentov. Kvôli mimoriadne nízkej koncentrácii železa v ľudských mozgových tkanivách je vykonávanie takýchto experimentov pomerne náročné. V skutočnosti sa nízko-teplotné Mössbauerove spektá mozgového tkaniva v literatúre nachádzajú len zriedka.

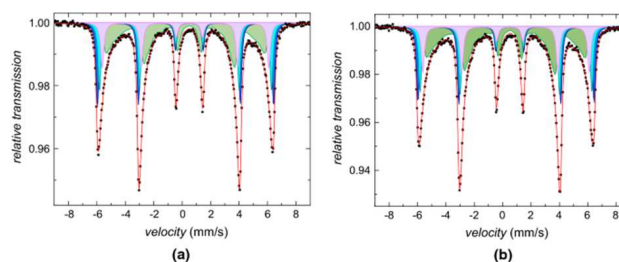
Sorpčné štúdie

Mössbauerovu spektrometriu možno použiť aj na štúdium sorpčných procesov v materiáloch, pričom poskytuje cenné informácie o miestnom prostredí a koordinácii atómov zapojených do sorpcie. V kontexte sorpčných procesov sa Mössbauerova spektrometria často používa v spojení s inými

analytickými technikami na získanie komplexného pochopenia systému.

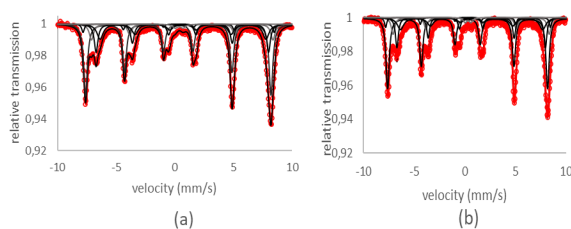
Mössbauerovu spektrometriu možno v sorpčných štúdiách použiť napríklad na charakteristiku sorpčných materiálov, čo zahŕňa skúmanie štrukturálnych a chemických vlastností sorpčných materiálov (napr. minerálov, zeolitov alebo oxidov kovov) pred a po sorpčnom procese.

V štúdiu zameranej na sorpciu seleničitanu na goethit, Mössbauerova analýza odhalila len minimálne štrukturálne zmeny goethitu počas sorpcie a teda po sorpcii seleničitanu došlo len k jemným modifikáciám pôvodného goethitu, vid' Obr. 2 [8]. Aj keď sú si obe Mössbauerove spektrá veľmi podobné, ich hyperjemné parametre odhaľujú jemné rozdiely medzi kontrolnou vzorkou goethitu bez seleničitanu a goethitu so seleničitanom [9].



Obr. 4. Mössbauerove spektrá a) goethit bez obsahu seleničitanu a b) goethitu upraveného seleničitanom [9]

K podobným výsledkom dospela Matulová a kol. [10] aj vo svojej ďalšej štúdiu, kde sa venovala sorpcii selénanu na goethit, kde Mössbauerova spektrometria nepreukázala žiadne štrukturálne zmeny po kryštalizácii oxyhydroxidov železa v prítomnosti selénanu. Mössbauerovu spektrometriu sme použili aj v štúdiu zameranej na sorpciu seleničitanu na nanomagnetit, ktorá odhalila, že jeho spektrum je zložené z piatich sextetov a jedného dubletu. Analýza hyperjemných parametrov ukázala, že jeden sextet bol pripísaný maghemitu, ktorý predstavoval 4 % z celkového počtu železných jadier vo vzorke, a 94 % železných jadier bolo identifikovaných ako magnetit. Zvyšné 2 % boli pripísané dubletu, ktorý s najväčšou pravdepodobnosťou pozostával zo superparamagnetických častíc maghemitu (Obr. 5a). Okrem toho, analýza Mössbauerových spektier po sorpcii (Obr. 5b) neukázala žiadne zmeny v relatívnej distribúcii koordinačných miest železa v minerálnej mriežke.



Obr. 5. Mössbauerove spektrum nanomagnetitu fitované piatimi sextetmi a jedným dubletom (a) pred a (b) po sorpcii seleničitanu

Mössbauerovu spektrometriu možno použiť aj na sledovanie zmien v lokálnom prostredí konkrétnych atómov počas adsorpčných a desorpčných procesov. Môže poskytnúť pohľad na interakciu medzi sorbátom a sorbentom, vrátane stavu koordinácie kovových iónov zapojených do procesu. Okrem toho môže pomôcť identifikovať reakčné produkty, ktoré sa môžu vytvárať počas sorpcie. To je užitočné najmä v prípadoch, keď sorpcia zahŕňa redoxné reakcie alebo zmeny v oxidačnom stave určitých prvkov. Je dôležité poznamenať, že Mössbauerova spektrometria je len jedným z niekoľkých nástrojov, ktoré možno použiť pri štúdiu sorpčných procesov. Kombinácia s inými technikami, ako je röntgenová difrakcia, infračervená spektroskopia a rôzne ďalšie zobrazovacie techniky, umožňuje získať komplexnejší obraz o sorpčných mechanizmoch a štrukturálnych zmenách vyskytujúcich sa na atómovej úrovni.

Záver

Podrobné prípadové štúdie ukazujú všestrannosť Mössbauerovej spektrometrie

MÁ ZMYSEL VYUŽÍVAŤ SEKVENČNÉ EXTRAKCIE VO FRAKCIONAČNÝCH ŠTÚDIÁCH RIZIKOVÝCH PRVKOV AK SÚ K DISPOZÍCII SPEKTROSKOPICKE METÓDY VHODNÉ NA PRIAMU ANALÝZU TUHÝCH MATERIÁLOV?

Ingrid Hagarová

Univerzita Komenského v Bratislave,
Prírododvedecká fakulta, Ústav laboratórneho
výskumu geomateriálov, Mlynská dolina,
Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava
ingrid.hagarova@uniba.sk

ako významného analytického nástroja, ktorý ponúka neoceniteľné poznatky o správaní železa v environmentálnych aj biologických kontextoch. Dôkladná analýza sorpčných javov a biologických dôsledkov interakcií železa objasňuje úlohu Mössbauerovej spektrometrie pri odhaľovaní zložitosti, ktorá je súčasťou systémov v reálnom svete.

Literatúra

1. L. Pašteka, M. Miglierini, M. Bujdoš, Acta Phys. Pol. A 131 (2017) 1078-1080
2. M. Miglierini, L. Pašteka, M. Cesnek, T. Kmječ, M. Bujdoš, J. Kohout, J. Radioanal. Nucl. Chem. 322 (2019) 1495-1503
3. M. Miglierini, J. Dekan, M. Urík, M. Cesnek, T. Kmječ, P. Matúš, Chemosphere 269 (2020) 128733
4. M. Urík, B. Farkas, M. Miglierini, M. Bujdoš, Z. Mitróová, H. Kim, P. Matúš, J. Hazard. Mater. 409 (2021) 124938
5. M. Urík, F. Polák, M. Bujdoš, M. Miglierini, B. Milová-Žiaková, B. Farkas, Z. Goneková, H. Vojtková, P. Matúš, Sci. Total Environ. 664 (2019) 683-689
6. Z. Goneková, M. Miglierini, M. Urík, M. Bujdoš, M. Cesnek, T. Kmjec, Acta Phys. Pol. A 137 (2020) 667-669
7. I. Bonková, M. Miglierini, M. Bujdoš, M. Kopáni, Acta Phys. Pol. A 131 (2017) 1081-1083
8. M. Matulová, M. Bujdoš, M. Miglierini, M. Cesnek, E. Duborská, K. Mosnáčková, H. Vojtková, T. Kmjec, J. Dekan, P. Matúš, M. Urík, Int. J. Mol. Sci. 22 (2021) 9955
9. M. Matulová, M. Urík, M. Bujdoš, E. Duborská, M. Cesnek, M. Miglierini, Chem. Pap. 73 (2019) 2975-2985
10. M. Matulová, M. Bujdoš, M. Miglierini, Z. Mitróová, M. Kubovčíková, M. Urík, Chem. Geol. 556 (2020) 119852

Abstrakt

Od publikovania prvého sekvenčného extrakčného postupu, ktorý bol využitý na frakcionáciu ťažkých kovov v sedimentoch, uplynulo už viac ako 40 rokov. Ak by sa aj mohlo zdať, že v súčasnosti je týmto extrakčným postupom venovaná menšia pozornosť, nie je tomu tak. Navrhnutých bolo nespočítateľne veľa rôznorodých postupov, ktoré boli aplikované na rôzne tuhé materiály; pričom týmto postupom nemožno uprieť ich užitočnosť, ale nemožno zatvárať oči ani pred ich obmedzeniami. V súčasnosti sú sekvenčné

extrakčné postupy často súčasťou komplexných environmentálnych štúdií, ktoré sa snažia pochopiť a vysvetliť rôzne bio-geochemické cykly mnohých prvkov (nielen toxických a potenciálne toxických, ale aj esenciálnych a biogénnych), ktoré sa nachádzajú v tuhých matriciach (najmä v pôdach a sedimentoch). Ak environmentálne laboratória disponujú spektroskopickými metódami, ktoré sú vhodné na priamu analýzu tuhých materiálov, bezpochyby ich v prípade vhodnosti využiť treba. Nič však nebráni použiť na rovnaké vzorky aj sekvenčné extrakčné postupy, ktoré môžu potvrdiť získané informácie, prípadne ponúknuť aj určité doplnkové informácie. Príklady získaných informácií po aplikovaní sekvenčného extrakčného postupu budú zdokumentované výsledkami experimentov z našich laboratórií.

Kľúčové slová

Sekvenčné extrakčné postupy, frakcionácia prvkov, pôdy, sedimenty.

1. Úvod

Environmentálne riziko toxických a potenciálne toxických prvkov, nachádzajúcich sa v tuhých matriciach, nepochybne závisí od ich formy, v ktorej sa vyskytujú, ako aj od toho, s akými frakciami monitorovaných tuhých matric sú viazané. Dôsledkom toho je značne zvýšený záujem o pochopenie asociácií sledovaných prvkov a definovaných frakcií monitorovaných tuhých materiálov v prírodných ako aj znečistených systémoch. Priame stanovenie chemických foriem rôznych prvkov v tuhých environmentálnych vzorkách, ako sú pôdy, sedimenty alebo kaly, sa dá dosiahnuť pomocou rôznych inštrumentálnych metód akými sú [1]: SXRF (*synchrotron-based X-ray radiation fluorescence*), PIXE (*particle-induced X-ray emission*), XANES (*X-ray absorption near edge structure*) a EXAFS (*extended X-ray absorption fine structure spectroscopy*). Aj keď sú tieto metódy značne účinné, stále nepatria k bežne dostupným. Ich nevýhodou je aj to, že často ponúkajú vysoké medze stanovenia, čo znamená, že sa dajú použiť iba v prípade vzoriek so značne zvýšenými koncentráciami sledovaných prvkov. Aj

d ďalšie spektroskopické metódy ako sú [2]: XAS (*X-ray absorption spectroscopy*), XRD (*X-ray diffraction*), EPMA (*electron probe microanalysis*), EDXS (*energy-dispersive X-ray spectroscopy*), LIBS (*laser-induced breakdown spectroscopy*) a LA-ICP-MS (*laser ablation inductively coupled plasma mass spectroscopy*) môžu byť použité na zistenie spojenia sledovaných prvkov s rôznymi definovanými frakciami tuhých monitorovaných environmentálnych materiálov. Aj tieto metódy majú okrem výhod aj svoje obmedzenia. Problémy možno očakávať v prípade analýzy prírodných vzoriek s vysokou heterogenitou, v prípade analýzy tuhých vzoriek s vysokým obsahom organických látok (kde je problematické oddelenie minerálnych fáz od organických látok) a aj v tomto prípade nemožno opomenúť fakt, že ešte stále nepatria k bežne dostupným. Uvedené obmedzenia, ako aj nedostupnosť spomenutých, značne finančne nákladných spektroskopických metód vedie k tomu, že záujem o sekvenčné extrakčné postupy neúfícha. Ide o nepriame prístupy, ktoré majú snahu získať informácie o viazaní sledovaných prvkov na rôzne definované frakcie tuhých environmentálnych materiálov, najmä pôd a sedimentov. Tieto prístupy však majú zásadné obmedzenia a jednoznačne ich treba považovať za operačne definované. Nedostatočná špecifita pri uvoľňovaní sledovaných prvkov, ich readsorpcia a možná následná redistribúcia medzi jednotlivými fázami, spolu s nedostatočnou možnosťou spoľahlivo porovnať publikované štúdie (vďaka tomu, že experimentálne parametre sa v publikovaných postupoch často značne líšia), zvyšujúce sa riziko kontaminácie s narastajúcim počtom krokov a predlžovaním celého postupu (ktorý často trvá aj niekoľko dní) sú hlavné výčitky, ktoré treba mať na zreteli [3]. Aj keď by sa mohlo zdať, že je éra sekvenčných extrakčných postupov vďaka uvedeným obmedzeniam na ústupe, nie je tomu tak. Svedčí o tom počet publikácií venovaných sekvenčným extrakciám, ktoré boli využité na frakcionáciu kovov v tuhých matriciach, ktoré možno nájsť napríklad v databáze ISI Web of Science. Aj napriek všetkému, čo bolo uvedené, je užitočnosť sekvenčných extrakčných postupov neodškriepiteľná. Nemožno im uprieť snahu

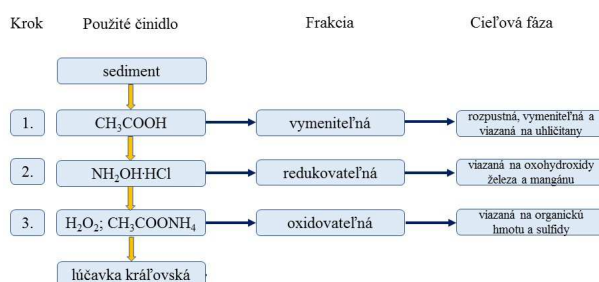
poskytnúť detailnejšie informácie o pôvode, spôsobe výskytu, biologickej, ako aj fyzikálno-chemickej dostupnosti, mobilizácii a transporte sledovaných prvkov. Z mnohých vedných disciplín, v ktorých možno nájsť využitie sekvenčných extrakčných postupov, nepochybne najviac publikovaných prác je v rôznych oblastiach ekologických a environmentálnych vied. Podľa databázy ISI Web of Science je to viac ako 62 %.

2. Niečo z histórie sekvenčných extrakčných postupov

Už je to viac ako 40 rokov, kedy bola publikovaná prvá sekvenčná extrakčná schéma. Tessier, Bisson a Campbell použili v roku 1979 päťkrokovú extrakciu na frakcionáciu Cd, Co, Cu, Fe, Pb, Mn, Ni a Zn v riečnych sedimentoch [4]. Použité extrakčné činidlá zvolili na základe ich schopnosti uvoľniť sledované kovy z určitej tuhej fázy sedimentu, a to buď výmennými procesmi alebo rozpustením tej-ktorej tuhej fázy. Jednotlivé kroky extrakcie boli navrhnuté tak, aby simulovali zmeny podmienok prostredia, ktoré by mohli ovplyvniť väzbu kovov v sedimentoch, a to: okyslenie (ako dôsledok kyslej dažďovej vody alebo kyslého priemyselného výtoku), redukcia (ako dôsledok post-depozičného uskladnenia) a oxidácia (ako dôsledok napr. bagrovania a následného uloženia anoxických sedimentov na pôdy).

Od publikovania tejto práce nasledovalo využitie sekvenčných extrakčných postupov na frakcionáciu rôznych rizikových prvkov v pôdach, ako aj iných tuhých materiáloch. Nasledovalo vypracovanie rôznych postupov s rôznym počtom krokov, činidiel a extrakčných podmienok, čo spôsobilo nemožnosť porovnať výsledky získané v rôznych laboratóriách. Snaha štandardizovať sekvenčné extrakčné postupy vyústila do návrhu trojkrokového postupu, ktorý bol vypracovaný pod záštitou referenčného úradu Komisie Európskej únie (BCR; *the Community Bureau of Reference of the Commission of the European Communities*) [5,6], ktorý sa často označuje ako BCR postup, BCR protokol alebo BCR schéma. Hlavný rozdiel medzi Tessierovým a BCR postupom je v tom, že prvé dva kroky

Tessierovej schémy boli nahradené krokom jedným. Ďalšie rozdiely sú v tom, že postup bol vypracovaný pre väčšie množstvá vzoriek a väčšie objemy extrakčných činidiel. Aj tento postup však narazil na nereprodukovateľnosť získaných výsledkov predovšetkým v druhom kroku, čo viedlo k prepracovaniu pôvodného BCR postupu a k návrhu tzv. upraveného BCR postupu [7], ktorý je schématicky znázornený na Obr. 1.

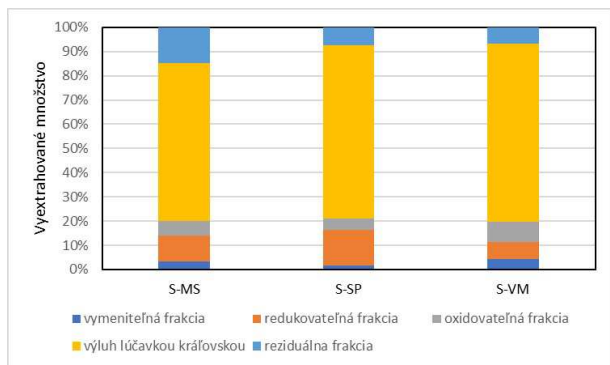


Obr. 1. Schématické znázornenie sekvenčného extrakčného postupu; uvedené extrakčné činidlá, frakcie a cieľové fázy sú podľa upraveného BCR postupu

Snaha validovať BCR postupy viedla k vytvoreniu certifikovaných referenčných materiálov (CRM) [8]. Sedimenty s certifikovanými koncentraciami pre Cd, Cr, Cu, Ni, Pb a Zn, ktoré sú extrahovateľné jednotlivými extrakčnými činidlami v pôvodnej [9,10] aj upravenej BCR schéme [11,12] boli označené ako CRM BCR 601 a CRM BCR 701. Aj príprava a následná komerčná dostupnosť týchto certifikovaných referenčných materiálov mala určite zásluhu na značnom náraste popularity sekvenčných extrakčných postupov v nasledujúcich rokoch. Okrem sedimentov boli použité sekvenčné extrakčné postupy na všetky možné typy pôd (poľnohospodárske, mestské, lesné, rizosférové, priemyselné ako aj iné), kaly, kompost, popolčky zo spaľovní rôznych odpadov, prach, vzduchové častice, ale aj mnohé iné tuhé materiály [1]. A aj napriek tomu, že v literatúre možno nájsť naozaj rôzne sekvenčné extrakčné postupy, Tessierov postup a BCR postupy patria jednoznačne k najpoužívanejším [13-27].

Ako výsledok použitia upraveného BCR postupu je uvedená distribúcia zinku v troch slovenských pôdach, konkrétne S-VM č. 12-1-07 Eutric Cambisol (Košice), S-MS č. 12-1-08 Orthic Luvisol (Prešov) a S-SP č. 12-1-09 Rendzina (Rožňava), znázornená na Obr. 2. Po

aplikácii upraveného BCR postupu bola reziduálna frakcia vypočítaná z rozdielu koncentrácií zinku zisteného po totálnom rozklade analyzovaných pôd a súčtu koncentrácií zinku stanovených v jednotlivých krokoch BCR postupu (súčet 1.+2.+3.+výluh lúčavkou kráľovskou).



Obr. 2. Distribúcia zinku v troch slovenských pôdach po aplikovaní upraveného BCR postupu

3. Niečo zo súčasnosti sekvenčných extrakčných postupov

V súčasnosti možno sekvenčné extrakčné postupy nájsť ako súčasť komplexných štúdií, ktoré sledujú alebo sa snažia objasniť bio-geo-chemické cykly rôznych prvkov; nielen toxických, potenciálne toxických, ale aj esenciálnych a biogénnych.

V nedávno publikovanom prehľade možno nájsť napríklad práce využívajúce sekvenčné extrakčné postupy, ktoré poslúžili ako indikátory frakcií toxických prvkov v pôdach, čo napomohlo pri vypracovávaní jednoduchých, ale aj komplexných indexov znečistenia pôd toxickými prvkami [28]. V ďalšom prehľade prác, v ktorých bola použitá škvára ako hnojivo pre pôdy kontaminované toxickými prvkami, napomohli sekvenčné extrakčné postupy odhaliť zníženie potenciálneho rizika pre rastliny pestované na takýchto pôdach [29].

Štúdie venované kobaltu, ktorý patrí medzi esenciálne stopové prvky pre ľudí a prospešné stopové prvky pre rastliny, avšak vďaka jeho nadmernej produkcii a následnému využitiu sa stáva kritickým a rizikovým, práve sekvenčné extrakčné postupy viedli k zisteniam, že v pôdnom systéme je kobalt rozdelený medzi labilné (rozpuštné a vymeniteľné) a relatívne nereaktívne (zvyškové) frakcie, pričom publikované výsledky zistených koncentrácií pre labilné

frakcie Co korelovali s koncentraciami, ktoré dokázali prijať rastliny [30].

Ortuť je toxický prvok, ktorý sa dostáva do atmosféry ako dôsledok prírodných procesov, ale aj antropogénnych aktivít. Akonáhle sa ortuť dostane do pôdy, interaguje s jej zložkami, pričom sa stáva súčasťou rôznych chemických a biologických procesov, čím sa zapája do rôznych bio-geo-chemických cyklov. Práve v prípade zisťovania biodostupných frakcií Hg možno v publikovanej literatúre naraziť na nejednu prácu, v ktorej sú využité práve sekvenčné extrakčné postupy [31-34].

To je iba pár prác, v ktorých je zosumarizované použitie rôznych sekvenčných extrakčných postupov, ktoré boli publikované v súčasnej literatúre; no aj to postačuje na potvrdenie toho, že záujem o sekvenčné extrakčné postupy je stále značný.

4. Záverečné poznámky

Ak sú k dispozícii spektroskopické metódy pre priamu analýzu tuhých materiálov, nemožno zaváhať a v prípade vhodnosti ich využiť určite treba. Sekvenčné extrakčné postupy, ktoré možno považovať za ekonomicky oveľa menej náročné a môžu ponúknuť určité doplnkové informácie, prípadne potvrdzujúce informácie, získané priamou analýzou tuhého analyzovaného materiálu, sú takisto vhodnou voľbou v rôznych environmentálnych štúdiách. Treba však byť kritický a mať na pamäti nedostatočnú špecifitu pri uvoľňovaní sledovaných prvkov, možnú readsorpciu a následnú redistribúciu medzi jednotlivými fázami, ako aj zvyšujúce sa riziko kontaminácie s narastajúcim počtom krokov a predlžovaním celého postupu. Preto je potrebné byť pri interpretácii získaných výsledkov opatrný. Ak však ide v danej štúdiu o odhad environmentálneho rizika, môžu plne postačovať výsledky, získané po aplikácii jednoduchých extrakcií s vhodne zvolenými extrakčnými činidlami, ktoré dokážu spoľahlivo vyextrahovať mobilné alebo potenciálne mobilné frakcie sledovaného rizikového prvku.

Práca vznikla v rámci riešenia projektu, ktorý je finančne podporovaný grantom Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR a Slovenskej akadémie vied VEGA 1/0135/22.

Literatúra

1. J.R. Bacon, C.M. Davidson, *Analyst* 133 (2008) 25-46
2. Y.H. Xu, J.H. Huang, H. Brandl, *J. Environ. Sci.* 53 (2017) 173-183
3. R.A. Sutherland, *Anal. Chim. Acta* 680 (2010) 10-20
4. A. Tessier, P.G.C. Campbell, M. Bisson, *Anal. Chem.* 51 (1979) 844-851
5. P. Quevauviller, G. Rauret, H. Muntau, A.M. Ure, R. Rubio, J.F. López-Sánchez, H.D. Fiedler, B. Griepink, *Fresenius J. Anal. Chem.* 349 (1994) 808-814
6. A.M. Ure, P. Quevauviller, H. Muntau, B. Griepink, *Int. J. Environ. Anal. Chem.* 51 (1993) 135-151
7. G. Rauret, J.F. López-Sánchez, A. Sahuquillo, R. Rubio, C. Davidson, A. Ure, P. Quevauviller, *J. Environ. Monit.* 1 (1999) 57-61
8. H.D. Fiedler, J.F. López-Sánchez, R. Rubio, G. Rauret, P. Quevauviller, A. M. Ure, H. Muntau, *Analyst* 119 (1994) 1109-1114
9. P. Quevauviller, G. Rauret, J. F. López-Sánchez, R. Rubio, A. Ure, H. Muntau, *Sci. Total Environ.* 205 (1997) 223-234
10. J.F. López-Sánchez, A. Sahuquillo, H.D. Fiedler, R. Rubio, G. Rauret, H. Muntau, P. Quevauviller, *Analyst* 123 (1998) 1675-1677
11. G. Rauret, J.F. López-Sánchez, *Int. J. Environ. Anal. Chem.* 79 (2001) 81-95
12. M. Pueyo, G. Rauret, D. Lück, M. Yli-Halla, H. Muntau, P. Quevauviller, J.F. López-Sánchez, *J. Environ. Monit.* 3 (2001) 243-250
13. P. Matúš, J. Kubová, M. Bujdoš, V. Streško, J. Medved', *Anal. Bioanal. Chem.* 379 (2004) 96-103
14. J. Kubová, V. Streško, M. Bujdoš, P. Matúš, J. Medved', *Anal. Bioanal. Chem.* 379 (2004) 108-114
15. P. Matúš, J. Kubová, M. Bujdoš, J. Medved', *Anal. Chim. Acta* 540 (2005) 33-43
16. M. Bujdoš, A. Muřová, J. Kubová, J. Medved', *Environ. Geol.* 47 (2005) 353-360
17. J. Kubová, P. Matúš, M. Bujdoš, J. Medved', *Anal. Chim. Acta* 547 (2005) 119-125
18. P. Matúš, J. Kubová, M. Bujdoš, J. Medved', *Talanta* 70 (2006) 996-1005
19. M. Žemberyová, J. Barteková, I. Hagarová, *Talanta* 70 (2006) 973-978
20. M. Žemberyová, R. Jankovič, I. Hagarová, H.M. Kuss, *Spectrochim. Acta Part B* 62 (2007) 509-513
21. P. Matúš, J. Inorg. Biochem. 101 (2007) 1214-1223
22. J. Kubová, P. Matúš, M. Bujdoš, I. Hagarová, J. Medved', *Talanta* 75 (2008) 1110-1122
23. J. Medved', M. Kališ, I. Hagarová, P. Matúš, M. Bujdoš, J. Kubová, *Chem. Papers* 62 (2008) 168-175
24. M. Žemberyová, I. Hagarová, J. Zimová, J. Barteková, H.M. Kuss, *Talanta* 82 (2010) 582-586
25. M. Šebesta, M. Urík, M. Kolenčík, M. Bujdoš, P. Matúš, *Forests* 11 (2020) 1077
26. E. Duborská, M. Bujdoš, M. Urík, P. Matúš, *Catena* 195 (2020) 104749
27. E. Duborská, M. Matulová, T. Vaculovič, P. Matúš, M. Urík, *Forests* 12 (2021) 1512
28. S. Khan, M. Naushad, E.C. Lima, S.X. Zhang, S.M. Shaheen, J. Rinklebe, *J. Hazard. Mater.* 417 (2021) 126039
29. S. Mehmood, X.K. Wang, W. Ahmed, M. Imtiaz, A. Ditta, M. Rizwan, S. Irshad, S. Bashir, Q. Saeed, A. Mustafa, W.D. Li, *Sustainability* 13 (2021) 5255
30. P. Banerjee, P. Bhattacharya, *J. Soil Sci. Plant Nutr.* 21 (2021) 2339-2354
31. J.H. Huang, W.H. Shetaya, S. Osterwalder, *Environ. Poll.* 263 (2020) 114323
32. M. Hlodák, P. Matúš, M. Urík, *Chem. Listy* 108 (2014) 1119-1124
33. M. Hlodák, P. Matúš, M. Urík, L. Kořenková, P. Mikušová, M. Senila, P. Diviš, *Chem. Listy* 109 (2015) 385-389
34. M. Hlodák, P. Matúš, M. Urík, L. Kořenková, P. Mikušová, M. Senila, P. Diviš, *Water Air Soil Pollut.* 226 (2015) 198

SPRÁVY Z ODBORNÝCH AKCIÍ**MÖSSBAUEROVSKÉ ROJENÍ 2023**

15. červen 2023

Olomouc, Česká republika

Vedecká konferencia českých a slovenských užívateľov Mössbauerovej spektroskopie sa uskutočnila opäť po dvoch rokoch dňa 15. 6. 2023 v Olomouci na pôde Katedry experimentálnej fyziky Prírodovedeckej

fakulty Univerzity Palackého (KEF PĚF UP). Tento seminár bol organizovaný pod vedením Organizačného a vedeckého výboru v zložení Vít Procházka (PĚF UP, Olomouc), Petr Novák (PĚF UP, Olomouc) a Marcel Miglierini (FEI STU, SSS/ZSVTS, Bratislava). Odborný program seminára venovaného spomienke na Karla Závětu pozostával z 15 prednášok v českom,

slovenskom a anglickom jazyku, ktoré prebiehali v zasadacej miestnosti v čase od 10. do 17. hodiny.



Za Slovenskú spektroskopickú spoločnosť, člena Zväzu slovenských vedecko-technických spoločností, vystúpili so svojimi prednáškami:

- Silvia Vyhnáleková (PriF UK, Bratislava), Špeciálna analýza železa v biologických matriciach s využitím Mössbauerovej spektroskopie,
- Dávid Košovský (FEI STU, Bratislava), Popis mikroštruktúry stredneentropických a vysokoentropických ocelí pomocou Mössbauerovej spektrometrie,
- Daniel Grey (FEI STU, Bratislava), ^{119}Sn and ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy in the study of Fe(Co)-Sn-B Metallic Glasses,
- Zuzana Goneková (PriF UK, Bratislava), Utilization of Mössbauer spectroscopy in

analysis of iron species and their distribution in ochreous materials,

- Marcel Miglierini (FEI STU, Bratislava), Štúdium vesuvianitu pomocou Mössbauerovej spektrometrie.



Po prednáškach nasledovala všeobecná diskusia o problémoch Mössbauerovej spektroskopie, zakončená exkurziou do laboratórií. Okrem odborného programu bol na seminári priestor aj pre spoločenskú diskusiu v rámci obedovej prestávky. Záverom by sme chceli poďakovať za vynikajúco zorganizované podujatie.

Zuzana Goneková

Foto: Silvia Vyhnáleková (1), KEF PŘF UP (1)

BUDÚCE ODBORNÉ AKCIE

SLOVENSKO A ČESKÁ REPUBLIKA

Kurz Odběry vzorků

4.-7. září 2023

Lednice, ČR

<http://www.2theta.cz>

75. Zjazd chemikov

4.-8. september 2023

Vysoké Tatry

<https://75zjazd.schems.sk>

24. Škola hmotnostní spektrometrie

10.-15. září 2023

Sněžné - Milovy, ČR

<http://skolams2023.spektroskopie.cz>

VI. Setkání uživatelů FTIR a Ramanových spektrometrů BRUKER

13. září 2023

Brno, ČR

<https://www.optikinstruments.cz>

Chemical Reactions in Foods IX

13-15 September, 2023

Prague, Czech Republic

<https://crf2023.eu>

4. Škola rentgenové mikroanalýzy

3.-5. říjen 2023

Praha - Libeň

http://www.spektroskopie.cz/?q=skola_rtg_mi_kroanalzy_2023

Seminár HERMES

10. október 2023

Košice

www.hermeslab.sk

Kurz Nové směry v anorganické analýze

9.-11. říjen 2023

Lednice, ČR

<http://www.2theta.cz>

Seminár HERMES

12. október 2023

Bratislava

www.hermeslab.sk

Kurz Měření vibračních spekter

8.-12. leden 2024

Praha, ČR

<http://www.spektroskopie.cz>

Kurz Interpretace vibračních spekter

15.-19. leden 2024

Praha, ČR

<http://www.spektroskopie.cz>

40th International Symposium on Microscale Separation and Bioanalysis

19-22 May, 2024

Brno, Czech Republic

<https://www.msb2024.org>

European Congress of Applied Chemistry

20-21 May, 2024

Prague, Czech Republic

<https://ecac24.materialsummit.com>

23rd Interdisciplinary Meeting of Young Life Scientists

20-23 May, 2024

Milovy, Czech Republic

<http://www.interdisciplinarymeeting.cz>

18. Česko-slovenská spektroskopická konference a konference Mössbauerova spektroskopie v materiálových vědách 2024

27.-31. květen 2024

Kurdějov, ČR

<http://www.spektroskopie.cz>

ZAHRANIČIE

12th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy

27 August - 1 September, 2023

Krakow, Poland

<https://icavs.org>

8th Asian Spectroscopy Conference

3-7 September, 2023

Tokamachi, Niigata, Japan

<http://www2.riken.jp/lab/spectroscopy/ASC2021>

16th International Conference of Biogeochemistry of Trace Elements and 21st International Conference of Heavy Metals

6-10 September, 2023

Wuppertal, Germany

<https://icobte-ichmet-2023.com>

13th International Conference on Instrumental Methods of Analysis

17-20 September, 2023

Chania, Crete

<http://aclab.web.auth.gr/ima2023>

Small molecule NMR conference

17-20 September, 2023

Baveno, Italy

<https://www.smashnmr.org>

6th International Mass Spectrometry

School

17-22 September, 2023

Cagliari, Sardinia, Italy

<https://www.spettrometriadimassa.it/imss2023>

6th International Environmental Chemistry Congress

30 October -02 November, 2023

Antalya, Turkey

<https://www.envirochem.org.tr>

41st International Conference on Environmental & Food Monitoring

20-24 November, 2023

Amsterdam, Netherlands

<https://iaeac.com>

SPOLOČENSKÁ RUBRIKA

Významné životné jubileá členov Slovenskej spektroskopickkej spoločnosti v roku 2023

Päťdesiatroční jubilanti

RNDr. Mariana Danková, PhD.

Päťdesiatpäťroční jubilanti

Ing. Viera Murárová

Šesťdesiatroční jubilanti

RNDr. Jana Blašková

prof. Dr. Detlef Günther

RNDr. Jarmila Nováková

Ing. Miroslav Petráš

Ing. Jarmila Švancarová, PhD.

Šesťdesiatpäťroční jubilanti

Ing. Božena Alaxinová

doc. Ing. Miroslav Fišera, CSc.

RNDr. Eva Terpáková, CSc.

Sedemdesiatroční jubilanti

prof. RNDr. Alžbeta Hegedúsová, PhD.

prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc.

Sedemdesiatpäťroční jubilanti

Ing. Anna Vlčáková

Osemdesiatroční jubilanti

RNDr. Ján Medveď, CSc.

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

Redakčná rada Spravodaja SSS

RNDr. Ján Medveď, PhD.

80-ročný

RNDr. Ján Medveď, PhD. sa narodil v roku 1943 v Nitrianskom Pravne, po Strednej priemyselnej škole chemickej v Bratislave absolvoval v roku 1967 Prírodovedeckú fakultu UK v Bratislave (odbor geológia-geochemia).

Od začiatku svojej profesijnej činnosti na Geologickom ústave SAV pôsobil v oblasti analytickej geochemie, zaoberal sa predovšetkým problematikou analýzy geologických materiálov metódami atómovej spektroskopie (najmä optickej emisnej spektrografie). V rámci riešenia úloh základného výskumu vypracoval viaceré kvantitatívne spektrochemické postupy stanovenia vedľajších a stopových prvkov

v silikátových a karbonátových horninách, mineráloch a rudách. V roku 1978 obhájil dizertačnú prácu. V roku 1992 získal od Slovenskej akadémie vied vedecký kvalifikačný stupeň IIa (samostatný vedecký pracovník).

V rokoch 1990 až 2009 pracoval na Geologickom ústave Prírodovedeckej fakulty UK v Bratislave. Jeho odborná práca bola v tejto etape zameraná na prvkovú analýzu vzoriek životného prostredia (vody, pôdy, sedimenty, rastliny, biologické materiály), neskôr na stanovenie veľmi nízkych obsahov zlata, striebra a tália v geologických materiáloch za využitia prekoncentračných postupov, na frakcionáciu toxických prvkov v pôdach a sedimentoch pomocou separačných postupov a ďalšie environmentálne aplikácie chemickej analýzy metódou atómovej absorpčnej spektrometrie s elektrotermickou atomizáciou a štatistické hodnotenie získaných výsledkov.

Je držiteľom 10 autorských osvedčení vynálezov, spoluautorom 2 monografií, 82 pôvodných vedeckých prác, z toho 34 v karentovaných časopisoch s množstvom citácií. Výsledky získané počas svojej dlhoročnej praxe a výskumu pravidelne zverejňoval aj na rôznych konferenciách a seminároch doma i v zahraničí. Bol

spoluriešiteľom množstva výskumných úloh a projektov a vedúcim 2 grantov VEGA. V rámci svojej pedagogickej práce prednášal, viedol semináre a cvičenia ale aj diplomové a doktorandské práce, bol členom Odborovej komisie pre doktorandské štúdium v geochemii.

Dr. Medveď aktívne pracoval v Československej spektroskopickej spoločnosti pri ČSAV v Prahe – v rokoch 1986-1993 bol členom jej Hlavného výboru a v Slovenskej spektroskopickej spoločnosti – bol členom Hlavného výboru SSS od jej založenia v 1993 do roku 2007. Bol aj členom Komisie pre československé referenčné materiály a Geochemicko-mineralogickej komisie Karpatsko-balkánskej geologickej asociácie. Podieľal sa na organizovaní viacerých domácich odborných podujatí (školení, kurzov, seminárov, konferencií a pod.). Jeho profesionálna činnosť a aktivity boli ohodnotené viacerými oceneniami. V roku 2016 sa stal čestným členom SSS.

Milý Janko, želáme ti pevné zdravie a veľa radosti pri tvojom chalupárčení a včelárení na Hadvige!

Jana Kubová a Peter Matúš

prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc. 70-ročný

Letos v červnu oslaví v plné práci sedmdesátiny prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc. (*17. 6. 1953), profesor v oboru analytická chemie, Ústav chemie Prírodovedecké fakulty Masarykovy univerzity.

Prof. Kanický v roce 1977 absolvoval studium chemie na Prírodovedecké fakulte (PřF) Univerzity Jana Evangelisty Purkyně v Brně (dříve a nyní Masarykova univerzita). V roce 1978 obhájil rigorózní práci tamtéž a získal titul RNDr. v oboru Analytická chemie. V roce 1990 získal titul CSc. na PřF Masarykovy univerzity. V roce 1996 se habilitoval na PřF MU a v roce 2003 byl jmenován profesorem pro obor Analytické chemie. V roce 2001 obhájil doktorskou

disertaci na Univerzitě Pardubice (předseda komise prof. Churáček) a získal titul DrSc.

Od absolutoria a jednoročného studijného pobytu na fakulte byl zaměstnán nejprve v Geologickém průzkumu Ostrava (1978-1991), poté na Pedagogické fakultě Masarykovy univerzity a od roku 1994 na PřF MU. Prof. Kanický byl řešitelem nebo spoluřešitelem 10 projektů (GA ČR, MPO, KONTAKT MŠMT, FRVŠ) a byl řešitelem projektu OP3V. V letech 2005 až 2007 byl vedoucím Katedry analytické chemie PřF MU. Od r. 2007 je zástupcem ředitele Ústavu chemie PřF MU. V letech 1999-2001 byl proděkanem pro organizační záležitosti fakulty, ediční činnosti a sociální záležitosti studentů, letech 2010 až 2018 byl proděkanem pro vědu, doktorské studium a mezinárodní vztahy. V letech 2007 až 2010 byl předsedou Oborové rady DSP Chemie na PřF MU, je členem oborové rady doktorského

studia PřF MU a oborových rad dalších univerzit (UPOL, UJEP Ústí nad Labem, VŠCHT Praha), byl členem stálé komise pro obhajoby doktorských disertačních prací (DrSc) ve Slovenské republice (ve vědním oboru analytická, environmentální a jaderná chemie). Je členem komise pro udělování hodnosti doktora věd (DrSc.) v oboru Analytická chemie (AV ČR). Vedl 20 diplomových prací a 11 úspěšně obhájených doktorských prací jako školitel nebo konzultant. Odborně je zaměřen na optickou a hmotnostní spektrometrii s indukčně vázaným plazmatem, analýzu geologických vzorků, prvkové mapování/ zobrazování a laserovou ablaci ve spojení s plazmovou spektrometrií. Rozsáhlá je i spolupráce prof. Kanického se zahraničními pracovišti v oboru atomové spektrometrie. Velmi intenzivní byla v letech 1993 až 2005 spolupráce s prof. Jean-Michel Mermetem (Université Claude-Bernard Lyon), na jehož pracovišti Laboratoire des Sciences Analytiques jsme s Viktorem absolvovali v letech 1997 až 2005 řadu vědeckovýzkumných pobytů, dále např. Université de Pau et des pays de l'Adour, Universidad de Córdoba, Universidad de la Laguna, Technická univerzita v Košiciach a řada dalších.

Prof. Kanický mimo výše uvedených činností pracoval aktivně v sekci atomové spektrometrie Československé

spektroskopické společnosti, která byla při rozdělení Československa přejmenována na Spektroskopickou společnost Jana Marka Marci. Společnost pod tímto názvem byla oficiálně zaregistrována 30. prosince 1992 a jejím předsedou byl zvolen prof. Ing. Karel Volka, CSc. Po prof. K. Volkovi byl do čela společnosti zvolen v r. 2005 prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc., který předsedá Společnosti dodnes. Spektroskopická společnost JMM od roku 2010 vypisuje soutěže o ceny Vladimíra Hanuše a Petra Sedmery za výsledky a badatelské úspěchy ve spektroskopii hmotnostní a jaderné magnetické rezonance. Společnost JMM podporuje i mladé nadějně spektroskopiky soutěží o nejlepší diplomovou práci a o nejlepší soubor publikovaných prací v oboru spektroskopie.

Viktor se osvědčil i jako „manažer“ Spektroskopické společnosti – hospodářské výsledky jsou velmi uspokojivé a může investovat do speciálních kurzů, konferencí a pod.

Prof. Kanický je sportovně založený, miluje zimní sporty, plavání, a především malou dcerku Karolínku. Chtěl bych Viktorovi k jeho sedmdesátinám popřát především pevné zdraví a neutuchající zájem o jeho koníčky, tedy spektroskopii, oblíbené sporty a cestování.

Vítězslav Otruba

OZNAMY, PONUKY, POŽIADAVKY

ČLENSKÉ POPLATKY

Členský poplatek za rok 2023 vo výške 5 EUR pre individuálnych členov alebo vo výške 50 EUR pre kolektívnych členov, prosím, uhradte na účet SSS v Tatra banke (Hodžovo námestie 3, 811 06 Bratislava), pobočka Karloveská 1, 841 04 Bratislava, č. ú.: **2921888728**, kód banky: **1100**, IBAN: **SK701100000002921888728**, BIC/SWIFT: **TATRSKBX**. 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 Kersabiec: Ako zabezpečiť kvalitu výsledkov v atómovej absorpčnej 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, 2-3, 2006 (Proceedings of XVIIIth Slovak Spectroscopic Conference), Technical University, Košice, 2006
7. M. Bujdoš, P. Diviš, H. Dočekalová, M. Fišera, I. Hagarová, J. Kubová, J. Machát, P. Matúš, J. Medved', D. Remeteiová, E. Vitoulová: Špeciácia, špeciálna 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
11. E. Plško: Všeobecná analytická chémia, Ing. Václav Helán – 2 THETA, Český Těšín, 2011
12. J. Kubová, M. Bujdoš (Eds.): Book of Abstracts (European Symposium on Atomic Spectrometry ESAS 2012 / XXth Slovak-Czech Spectroscopic Conference), Comenius University, Bratislava, 2012

Cena publikácií č. 1-3, 5, 6, 8-10, 12: 5 EUR + balné a poštovné

Cena publikácií č. 4, 7, 11: 10 EUR + balné a poštovné

PRÍSTROJE A CHEMIKÁLIE

SSS si dovoľuje požiadať 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.

SÚŤAŽ

SLOVENSKÁ SPEKTROSKOPICKÁ SPOLOČNOSŤ

vyhlasuje na roky 2023 a 2024

14. kolo

Súťaže vedeckých prác mladých spektroskopikov

Do súťaže môže byť poslaný článok alebo súbor článkov autora, ktorý v príslušnom roku 2023/2024 nepresiahne vek 35 rokov. Článok alebo súbory článkov na spektroskopickú tému publikované v období 2023-2024 treba poslať na adresu SSS do 30. septembra 2024. Akceptované sú experimentálne články, ktoré boli publikované alebo prijaté redakčnou radou niektorého vo *Web of Science Core Collection* impaktovaného vedeckého

časopisu. V prípade spoluautorstva sa žiada čestné prehlásenie autora o jeho podiele na publikácii. Okrem uznania a spoločenského ocenenia je súťaž aj finančne dotovaná z prostriedkov SSS. Oceneným autorom bude navyše udelené aj jednoročné členstvo v SSS. Výsledky súťaže budú vyhlásené na príslušnom odbornom podujatí v roku 2024 a zverejnené v Spravodaji SSS.

Peter Matúš

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 recenzovaný 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:

ÚLVG PriF UK, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4
tel. č.: 02/60296280, e -mail: sss@spektroskopia.sk
<http://www.spektroskopia.sk>

Redakčná rada:

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

Redakčná úprava: doc. RNDr. Peter Matúš, PhD.

ISSN 1338-0656