

CHEMIE JAKO ZDROJ INSPIRACE V MOLEKULOVÝCH VĚDÁCH*

RUDOLF ZAHRADNÍK

Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského, Akademie věd České republiky, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
rudolf.zahradnik@jh-inst.cas.cz

Klíčová slova: výpočty energie, vazba van der Waalsova, kyselina fluorná, nelinearita polyynů, barva MgO, chemie a molekulové vědy

Úvod

Čas od času vzpomínám na dobu před 15 či 20 lety, kdy byl v mnoha odborných kruzích rozšířen názor, že fyzika a biodisciplíny jsou ty oblasti vědy, o jejichž budoucnosti netřeba pochybovat. Naproti tomu chemie ztrácela v očích některých velkou důležitost, kterou měla po více než 150 let, a někteří dokonce soudili, že se stává vědou spíše pomocnou. Jiní tomu však ani na chvíli nevěřili a vznik a rozsah molekulových věd (rozpínajících se od části fyziky, přes chemii, mnohé biodisciplíny až po část lékařství) přinesl přesvědčivý doklad o tom, že nevěřili právem. Pozice chemie v molekulových vědách svědčí o tom, že bývá pro celou oblast zdrojem inspirace, ale často též hnací silou rozmachu v oblastech s chemií hraničících.

V tomto článku se pokusím naznačit, co mám na mysli. Půjde o krátký popis snad s rozmyslem vybraných pěti historek, které mají dosvědčit správnost výše uvedeného názoru. Ty historky se týkají: (1) výpočtu energie molekul, (2) role van der Waalsových vazeb v molekulových vědách, (3) důvodů, proč dlouhé řetězce kumulenu a polyynů nemusí být lineární, (4) mechanismu podivuhodných oxidací kyselinou fluornou a (5) údivu nad tím, že oxid hořečnatý (v molekulové formě) je červený.

1. Výpočty energie molekul

Všechny zásadní a základní teorie, které chemie má k dispozici (klasická, kvantová a statistická mechanika, termodynamika, teorie srážkových procesů a další), jsou dílem fyziky. Stejně je tomu se všemi rozhodujícími pokusnými metodami, které slouží k určení struktury

(rentgenostrukturní analýza, hmotnostní spektrometrie, spektroskopie v radiofrekvenční oblasti: NMR a ESR), jsou dílem fyziků. K podivuhodně rozsáhlému a fantazieplnému jejich využití došlo především zásluhou chemie, chemiků. Odtud se vrací do molekulové fyziky a nastupují úspěšnou pouť do molekulové biologie.

Výpočet energie molekul je jedna z hlavních úloh molekulové kvantové mechaniky. Je známo, že to, co v chemii potřebujeme, nejsou hodnoty energie, ale hodnoty změn energie. Konkrétně v případě procesu (1) je to změna energie, ΔE , jež provází studovaný proces.

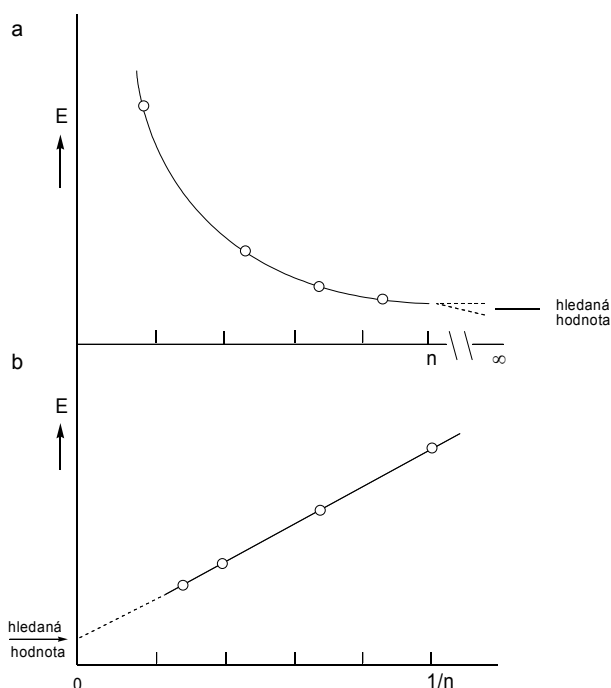


K těmto veličinám, tedy změnám energie, dospíváme pomocí energií reaktantů a produktů:

$$\Delta E = E(R-S) - E(R) - E(S) \quad (2)$$

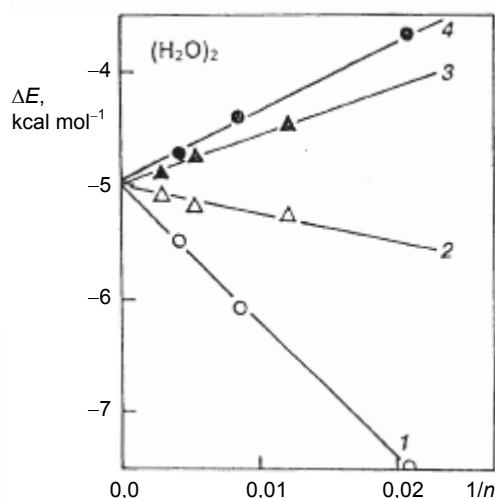
Z praktických důvodů získáváme v kvantové chemii celkové energie molekul sečtením dvou příspěvků, totiž energie, jež se označuje E^{SCF} (jež však nepopisuje dosti kvalitně vzájemné odpuzování elektronů, SCF značí *self-consistent field*), a energie označované E^{CORR} , která chybu E^{SCF} zmenšuje. Provedeme-li výpočet korelační energie, E^{CORR} , náležitě (např. metodou konfigurační interakce), je zmenšení oné chyby pronikavé. Pro daný způsob seřetězení atomů (charakterizovaných pořadovým číslem atomu a počtem elektronů) jsme schopni výpočet zkvalitňovat tím, že zvyšujeme počet orbitalů, popisujících elektrony na každém z atomů molekuly. Tato zdánlivá libovůle je opravdu jenom zdánlivá: zkvalitnění výpočtu (oběma zmíněnými metodami, tedy metodou dávající E^{SCF} a E^{CORR}) zvýšením počtu funkcí (orbitalů) na jednotlivých centrech (atomech) toliko přibližuje hodnotu vypočítané celkové energie *shora* k přesné hodnotě, o níž usilujeme; žádná chyba nám nehrozí. Naší ctizádostí je přiblížit se přesné hodnotě (na dané výpočtové úrovni) co nejvíce, a proto usilujeme o výpočet s velkým počtem funkcí na jednotlivých atomech. Ovšem něco za něco: s rostoucím počtem funkcí rychle roste rozsah výpočtu a dosažení přesné (konečné) hodnoty na dané úrovni není reálné. Je vskutku dobře, že se před několika lety objevily v literatuře soubory funkcí, jež lze rozšiřovat krok za krokem obratně definovaným způsobem: autorem těchto souborů bází je Dunning¹. Tyto báze (označované jako „correlation consistent polarized valence X-zeta basis sets“, zkratkou cc-pVXZ) jsou rozšiřovány konzistentním způsobem a X v nich značí velikost báze (informaci o velikosti bází lze získat např.

* Sestaveno z vybraných částí přednášek proslovených na TU Berlin a ve „Fritz-Haber-Institut“ Společnosti M. Plancka, Berlin v červnu 2006.



Obr. 1. a) Závislost energie E fiktivní molekuly M na velikosti báze vyjádřené celkovým počtem funkcí n . Z tvaru závislosti je zřejmá obtížnost korektního odhadu E pro $n = \infty$. b) Extrapolace lineární závislosti v souřadnicích E a $1/n$ je snadná, protože extrapolujeme (téměř) lineární závislost k nule

z monografie Čárskeho a Urbana²). To podstatné, oč jde, je to, že nám tyto báze dovolují závislost hodnoty energie na rostoucí velikosti báze „protáhnout“ extrapolací do nekonečna. Situace je velmi uspokojivá u zmíněné metody SCF (metoda Hartreeho-Fockova-Roothaanova): extrapolace k nekonečnu vede k definovanému pojmu, k tzv. Hartreeho-Fockově limitě. (O různých možnostech extrapolace viz práci³.) Ze schematického obrázku 1a je vidět, že přímočará extrapolace k nekonečnu není nikterak lehká záležitost. Obtíž se lze zbavit, přejdeme-li od souřadnic E a n (celkový počet funkcí) k souřadnicím E a $1/n$ (obr. 1b): od svízelné extrapolace k nekonečnu tak přejdeme ke snadno proveditelné extrapolaci k nule. Je to o to snazší, že uvedenou změnou souřadnic vždy získáme téměř lineární závislost. Je třeba mít na mysli, že u malých species (dvou a tříatomové systémy) lze provést výpočty energie s postupně rostoucími bázemi pro $X = 2, 3, 4, 5$ a 6 . U molekul poněkud větších lze obvykle provést výpočty pro $X = 2, 3$ a 4 ; výpočty pro větší báze nelze provést na běžně dostupných počítačích. Počet bodů pro extrapolaci je tudíž malý. Navíc je třeba jej zmenšit ještě o jeden (tedy ze tří na pouhé dva), protože nejmenší v Dunningově sérii bází, báze „double zeta“ ($X = 2$) jako jediná není dostatečně konzistentní s bázemi většími. Zbývají báze dvě, báze s $X = 3$ (TZ, „triple zeta“) a $X = 4$ (QZ, „quadruply zeta“), což je pro extrapolaci žalostně málo. Uzavřít tyto poznám-



Obr. 2. Závislost vypočítané změny energie ΔE , provázející tvorbu dimeru vody, na reciproké hodnotě celkového počtu funkcí v bázi, $1/n$: 1, standardní báze; 2, rozšířené báze. Další výpočty zahrnovaly superpoziční chybu: 3, standardní báze; 4, rozšířené báze. (Převzato z práce uveřejněné v *Helv. Chim. Acta* 84, 1328 (2001) se souhlasem vydavatele.)

ky lze přesto povzbudivě. Vypočítané hodnoty energií, o nichž je řeč, jsou založeny na rigorózní teorii, a proto nehrozí rozptyl, s nímž se setkáváme i u „dobře se chovajících“ pokusných dat. A proto vede takto provedená extrapolace vždy ke zlepšení hledané hodnoty energie.

Postupme dále. V chemii nám jde téměř vždy o změny energie a ne o jejich absolutní hodnoty. Vraťme se proto k rovnicím (1) a (2) a uveďme rovnou, že zmíněná extrapolace lze použít stejně dobře i pro změny energie. Pro případ vzniku dimeru vody to ilustruje obr. 2. Místo jediné očekávané závislosti ΔE na velikosti báze (pro TZ, QZ a řekněme pro 5Z) jsou na tomto obrázku závislosti čtyři. Vedle závislosti označené 1 (získané pro standardní Dunningovy báze), jde o závislost 2, jež byla získána výpočty s rozšířenými standardními Dunningovými bázemi (v angličtině se mluví o „augmented“ bázích). Tyto báze, v souladu s výše uvedenou poznámkou, vedou k nižším absolutním hodnotám energie. Projeví se to i na hodnotách změny energie. Je však patrné, že obě závislosti vedou k téže extrapolované hodnotě ΔE pro $1/n = 0$. V úsilí o dosažení správné hodnoty ΔE jsme pokračovali dále tím, že jsme vzali v úvahu tzv. superpoziční chybu a to jak pro prosté (závislost 3), tak i pro rozšířené báze (závislost 4). Závěr je jasně patrný z obr. 2. Všechny čtyři závislosti spějí ke společné hodnotě ΔE , což extrapolovanou hodnotu $-5,0 \text{ kcal mol}^{-1}$ pro dimeraci vody (obr. 2) činí vskutku věrohodnou.

Rigorózní teorie chemie pochází z teoretické fyziky.

Za zmínku stojí, že široké spektrum různě vyspělých kvantověchemických metod, které byly vyvinuty v posledních padesáti letech, mají však na svědomí převážně teoreticky orientovaní chemici. Vypracované metody slouží nejen v klasické oblasti chemie, ale i v molekulové fyzice a molekulové biologii.

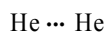
2. Chemická vazba a van der Waalsova vazba

Zanedlouho po vzniku kvantové mechaniky uprostřed dvacátých let došlo k prvním aplikacím v oblasti chemické vazby. Heitler a London, jakož i Hund a Mulliken přispěli rozhodujícím způsobem ke vzniku metody valenční vazby (VB) a metody molekulových orbitalů (MO). K ojedinělým aplikacím docházelo už ve 30. letech a ideje obou zmíněných metod začaly zvolna pronikat do učebnic fyzikální chemie. Po ukončení války v r. 1945 pozvolna nastal rozmach vníkáni, především metody MO, do chemie⁴. V 50. letech se studenti na dobrých školách dovídali o základech teorie chemické vazby. Po nelehkých začátcích (část chemické veřejnosti hleděla na aplikace s nedůvěrou) nastal v 60. letech větší rozmach. Na počátku 21. století lze jen stěží nalézt v předních chemických časopisech práce, v nichž nejsou pokusná data podložena kvantověchemickými výpočty. Kursy teorie chemické vazby jsou běžnou součástí výuky.

Po těchto slovech o chemické vazbě lze přistoupit k jádru této kapitoly, ke slabé mezimolekulové vazbě, které jsme, myslím právem, léta říkali vazba van der Waalsova (zkráceně vazba vdW)⁵. Interakční energie procesů, vedoucích k chemické (kovalentní) vazbě je o jeden až dva řády větší než změna energie provázející vznik vdW species. Nepřekvapuje, že zatímco délky chemických vazeb bývají v oboru 0,1–0,25 nm, činivá délka vazeb vdW 0,2 až 0,5 nm; v důsledku toho mívá vlnčet valenční vibrace chemické vazby hodnotu 1000–2000 cm⁻¹, kdežto u vdW systémů (jejichž vdW vazba velice měkká) činivá 10 až 100 cm⁻¹.



1

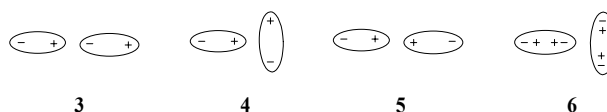


2

Za prototyp obou typů vazeb lze pokládat např. kovalenci v molekule vodíku (1) a vdW vazbu ve vdW molekule (He)₂ (2). Pro kovalentní vazbu je použito tradiční spojovací čárky, tři tečky jsou vhodným symbolem pro vdW vazbu.

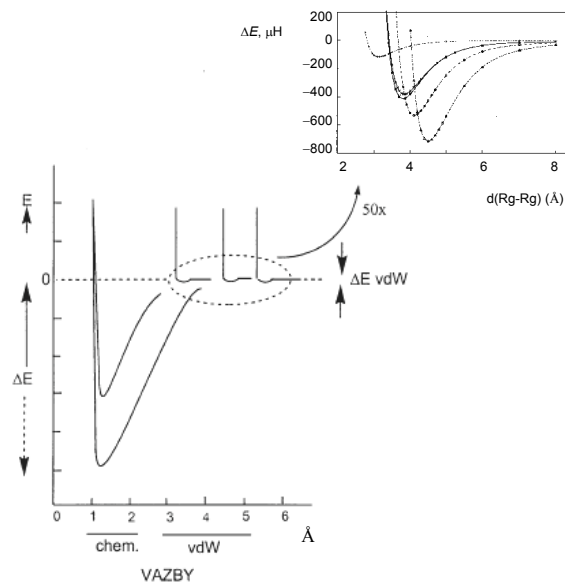
Zatím jen krátce konstatujeme, že klasické molekuly vytvářejí vdW asociáty (tedy vdW molekuly) v důsledku přitažlivých sil, které působí mezi elektrickými multipóly. Většina molekul má permanentní multipól, přičemž největší roli hrají dipóly a lineární a nelineární kvadrupóly; v dalším textu se k tomuto bodu ještě vrátím. Vazebná, nevazebná a antivazebná interakce dvou elektrických dipólů je naznačena ve „vzorcích“ 3–5. V případě lineárního kvadrupólu se vazebná interakce vyznačuje tvarem T (6).

Jako příklad lineárních kvadrupólů mohou posloužit molekuly vodíku, dusíku, acetyleny a benzenu.



Souhrnnou informací o tom, co bylo řečeno, uvádí obr. 3. Jde o potenciální křivky (křivky potenciální energie) dvou typických kovalentních, dvouatomových molekul a několika vdW dvouatomových molekul (v našem případě jde o dimery atomů vzácných plynů). Vztah světa kovalentních a vdW species, patrný z obr. 3, platí pro celou oblast chemie a vdW chemie.

V chemii se uplatňují vdW interakce rozhodujícím způsobem v oblasti fyzisorpce a solvatace; o významu těchto oblastí nelze pochybovat. Situace v oblasti veškerých biodisciplín je však ještě vyhraněnější: bez způsobnosti popsat vdW interakce by byla teorie v celé této oblasti bez vyhlídek. Je ovšem pravda, že i v živé hmotě bývá jádro procesů spojeno s tvorbou či zánikem kovalentních vazeb, avšak tomuto procesu vždy předchází orientovaná vdW interakce partnerů v biologickém systému (tak je tomu např. u procesů enzym – substrát, antigen – antilátka, či hormon – receptor). Vnikání do podstaty procesů, probíhajících v živé hmotě, vyžaduje co největší podporu pokusných studií výpočtovými metodami. Je třeba znovu zdůraznit, že metody molekulové kvantové mechaniky



Obr. 3. Křivky potenciální energie dvouatomových molekul s minimem energie (50 až 150 kcal mol⁻¹) s mezijadernou vzdáleností 1 až 2 Å a vdW molekul s minimem energie (0,5 až 2 kcal mol⁻¹) s mezijadernou vzdáleností 3 až 5 Å. V pravém horním rohu jsou uvedeny skutečné křivky pro (Ne)₂ až (Xe)₂ (cit.⁶); škála energie je zvětšena asi padesátkrát. V případě (Ar)₂ byl proveden výpočet dvěma metodami, proto jsou u (Ar)₂ dvě křivky

jsou stejně způsobilé k popisu jak „klasických“ molekul, tak vdW molekul. Zatímco při popisu molekul lze dosti často uspět metodami, které nepatří k nejvyspělejším (a jsou proto finančně málo náročné), popis vdW species vyžaduje metody velmi kvalitní, konkrétněji řečeno metody, popisující korektně nejen SCF část celkové energie, ale co nejlépe i příspěvek korelační energie. Z praktického hlediska se uplatňuje velká svízeľ, která spočívá v tom, že takto kvalitní výpočty lze provést jen u malých systémů; s vynaložením výpočtového úsilí i u molekul střední velikosti. V molekulové biologii jde však často o systémy velké či obří (systémy obsahující stovky atomů), kde zatím rigorózní výpočty nemají šanci. Východisko pro nejbližší léta se podařilo najít v podobě empirických potenciálů, označovaných někdy názvem molekulová mechanika. Jak už bylo krátce zmíněno, vdW interakce jsou spjaty s interakcemi elektrických multipólů, přičemž dva prvé členy multipólového rozvoje, dipól a kvadrupól hrají největší úlohu. A dále je třeba uvést, že jde nejen o interakce mezi permanentními multipóly, ale navíc i o interakci mezi permanentními a indukovanými multipóly a o interakci mezi časově proměnnými a indukovanými multipóly. Tyto interakce se označují jako elektrostatické (či coulombické), indukční a disperzní. Prvé a druhé lze snadno počítat v rámci klasické elektrostatiķy, třetí (tedy disperzní interakce) jsou popsitelné rigorózně pouze pomocí kvantové mechaniky. Nic však nebrání tomu získat přijatelný odhad pomocí empirické formule, zahrnující např. polarizability vazeb. Dodejme, že konstanty, vyskytující se v empirických výrazech, lze získat pomocí výpočtů provedených pro vhodně vybrané malé a středně velké molekuly kvantověchemicky; hledané hodnoty konstant empirických potenciálů justujeme pomocí získaných výsledků kvantověchemických výpočtů. Je povzbudivé, že se podařilo vypracovat empirické potenciály, umožňující rychlý a kvalitní popis velikých, biologicky významných systémů. Ovšem to se týká pouze případů, kde se uplatňují výlučně vdW interakce, ne právě interakce chemické. Už před lety se pracovalo v několika laboratořích o kombinovaném postupu; lze ho naznačit na případu enzymem katalyzované reakce. Chemický děj v reakčním centru se popisuje kvantověchemicky a interakce vdW mezi bílkovinnou částí enzymu a substrátem pomocí empirických potenciálů v rámci molekulové mechaniky. Přijatelné úrovně dosáhl postup označovaný QM/MM (Quantum Mechanics, Molecular Mechanics)⁷; k dokonalosti má však dosud daleko.

To, co tato oblast tíživě postrádá, jsou kvalitní, ne lehce získatelná pokusná data pro vdW molekuly. Podrobné informace lze získat v nedávné práci o vdW systémech^{5c}.

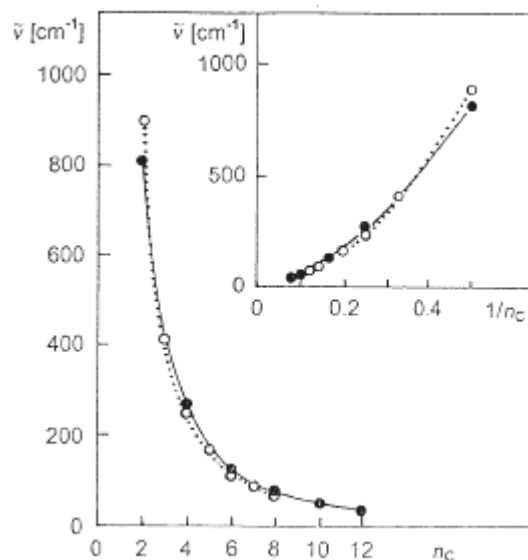
Rozmach bádání v různých oblastech molekulové biologie vyžaduje naléhavě náležitou přípravu mladé generace. Kéž si biochemický dorost uvědomí co nejdříve, že v molekulových vědách (jichž jsou biodisciplíny součástí) vyžaduje náležitě dotažení studií slušnou znalost matematiky a fyziky. Svě pověsti dbalé přírodovědné školy by měly bez průtahů zavést přiměřenou a kvalitní výuku o vdW interakcích (třeba v kurzech teorie chemické vazby),

jakož i kvalitní výuku matematiky a fyziky pro biology a biochemiky. Chemie pro to připravila potřebné podklady.

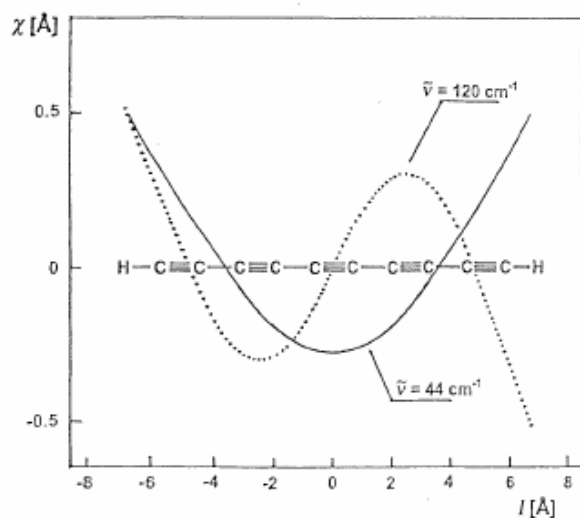
3. Proč dlouhé řetězce uhlíkových atomů kumulenu a polyynu nemusí být lineární?

Je známo, že atomové orbitály 2s a 2p v hybridizované podobě vystihují stereochemii vazeb na uhlících v parafínech (tetragonální hybridizace, sp³), v planárních konjugovaných uhlovodících (trigonální hybridizace, sp²) a v acetylenech (lineární hybridizace, sp). Ve výuce a v učebnicích se proto zdůrazňuje lineární, rigidní struktura kumulenu a polyynu. Žádnou jinou strukturu se nám, lze říci pochopitelně, nepodařilo nalézt u řad těchto uhlovodíků na příslušných energetických hyperplochách, tedy na závislostech jejich celkové energie na polohách atomů, jež je vytvářejí. Tyto studie jsme prováděli⁸ v souvislosti se zájmem o možné součástky molekulových zařízení, spojené se zájmem o jejich spektra a elektrickou vodivost. (Tato tematika nás provokovala už před lety⁹).

Strnuli jsme, když jsme v literatuře našli výsledky rentgenostrukturní analýzy¹⁰ uhlíkatých řetězců nesoucích na konci organokovové substituenty. Jde o útvary tvaru protáhlého S či protáhlého oblouku. Vyprovokovalo nás to k novému vyšetřování hyperploch, jakož i hyperploch molekul porušených interakcí se sousední molekulou, ne-



Obr. 4. Vlnočty energeticky nejméně náročného deformačního modu kumulenu (○) a polyynu (●) $\tilde{\nu}$ vynesené proti počtu uhlíků v řetězci, n_c . Pro usnadnění odhadu vlnočtů pro nekonečné uhlovodíky bylo použito rektifikace nelineární závislosti, zobrazené v pravé horní části obrázku. (Převzato z práce⁸ se souhlasem vydavatele.)



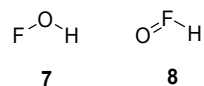
Obr. 5. Grafické zobrazení vibračních vlnových funkcí (χ) dvou energeticky nejméně náročných deformačních módů u dekaptaynu. (Převzato z práce⁸ se souhlasem vydavatele.)

vedlo to však k žádné nové, nečekané struktuře. Možné řešení se objevilo při analýze vibračních spekter polyynů a kumulenů. Pomocí obr. 4 a 5 lze rychle ozřejmit⁸, co se nabízí jako možný důvod existence nelineárních struktur. Na obr. 4 je vynesena závislost vlnočtu energeticky nejméně náročného deformačního modu na počtu atomů C v kumulenu a polyynu. Prodlužování řetězce má za následek velmi rychlý pokles vlnočtu (a tudíž i energie) sledovaného deformačního modu. Z toho plyne, že tradiční pohled na kumuleny a polyyny je nesprávný: nejde o tuhé tyčinky, naopak jde o velice snadno deformovatelné útvary. Neméně pozoruhodné je grafické zobrazení dvou nejméně náročných deformačních módů (obr. 5): ten, který odpovídá u C 10 acetylenu vlnočtu 44 cm^{-1} je spojen s deformací tvaru protaženého oblouku a mod následující (120 cm^{-1}) je spojen s pohybem atomů, vedoucím k esovité struktuře. U molekul ještě delších činí vlnočty sledovaných deformačních vibrací $20\text{--}30\text{ cm}^{-1}$, jde tedy o módy mimořádně měkké, módy, jež jsou typické pro vdW molekuly a ne pro „klasické“ molekuly.

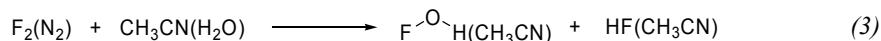
Za zmínku stojí, že jde o obecný jev. S rostoucí délkou řetězce klesá pronikavě vlnočty deformačního modu u (kvazi)lineárních molekul rozmanitých typů. Totéž se zřejmě týká i molekul nukleových kyselin. Tudíž interkalace u DNA může proběhnout snadněji, než se obvykle domníváme. V biomedicíně jde nesporně o užitečný podnět.

4. Mechanismus oxidace kyselinou fluornou

Kyselina fluorná (7) a její izomer (8), fluorosylhydrid poutají pozornost v různých souvislostech¹¹. Zdá se však, že význam kyseliny fluorné jako účinného, ale nedestruktivního oxidačního činidla, jež nachází velice široké použití v chemii, je mimořádný.



O velmi mnohé poznatky o této oxidaci se zasloužil S. Rozen¹². Když před 20 lety začínal uveřejňovat práce v této oblasti, provázely to, jak autor píše, četné svízele^{12a} s recenzenty i redakcemi chemických časopisů. Odpor a obava spjatá v chemické komunitě s prací s plynným fluorem je tak zakořeněná a velká, že se nelze divit. Rozen však houževnatě opakuje, že z technického hlediska jsou oxidace kyselinou fluornou zvládnutelné v každé slušně vybavené chemické laboratoři. Roztok kyseliny fluorné připravuje zaváděním plynné směsi fluoru a dusíku (1:9) do acetonitrilu, obsahujícího vodu (rovn. (3)); rozpouštědla jsou uvedena v závorkách.



Rozen publikoval mnoho desítek prací (souhrnně o tom viz práci^{12a}), jež jsou přesvědčivým dokladem univerzálnosti tohoto oxidovadla. Jako malou ilustraci lze uvést oxidaci thioetheru na sulfoxid a sulfon a oxidaci ethylenu na ethylenoxid. Oxidace zdárně probíhá i u substituovaných ethylenů, včetně tetrasubstituovaného. To není nikterak banální zjištění. Ostatně průmyslově se nedaří získávat ethylenoxid jinak než pomocí katalyzátou obsahujícího stříbro¹³.

To, co po letech zůstává objasněno zcela nedostatečně, je mechanismus těchto oxidací. S jistou výpočetní obratností lze sledovat kvantověchemicky přechod od reaktantů k produktům a při pečlivém provedení lze odhalit nejen stabilní meziprodukty na této cestě, ale i Eyringovy aktivované komplexy. Mám pocit, že jsme ve vlastních úvahách¹⁴ poměrně dlouho přeceňovali úlohu acetonitrilu. Samotná kyselina fluorná se při těchto výpočtových studiích nechovala jako oxidovadlo; ani přítomnost CH_3CN na tom nic neměnila. V modelovém výpočtu (s náležitým zahrnutím korelační energie) interakce ethylenu s FOH jsme nikdy nezískali ethylenoxid, ale toliko komplex FOH s ethylenem, v němž se uplatňuje vodíková vazba (schéma 1).

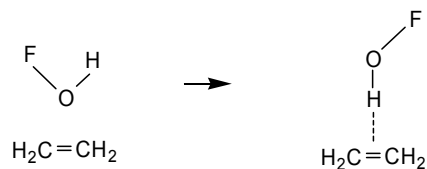


Schéma 1

Pronikavou změnu jsme pozorovali při použití dimeru (FOH)₂ jako oxidovadla, dimeru, v němž jsou podjednotky vázány dvěma vodíkovými vazbami. Podrobně je reakční cesta popsána na schématu 2 (jsou uvedeny pouze mezi-produkty, které pokládáme za hlavní). Velice výmluvné je zjištění, že vznik ethylenoxidu je spojen s nízkou energetickou bariérou, jež činí méně než 3 kcal mol⁻¹.

Chemik neodolá pokušení použít chlor místo fluoru, tedy pokusit se oxidovat kyselinou chlornou. Ukazuje se

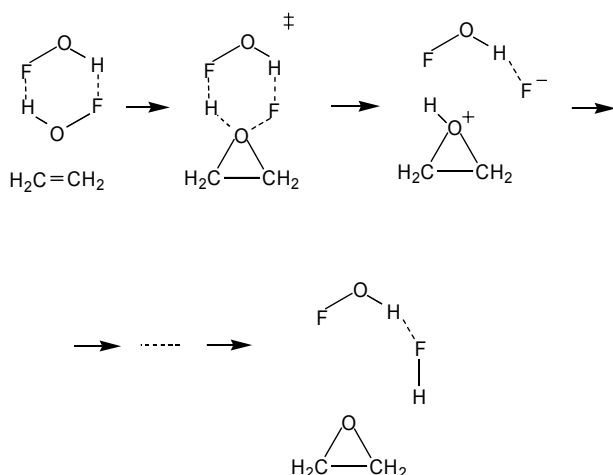


Schéma 2

však, že ani monomerní, ani cyklická dimerní forma k žádnému produktu oxidace nevede. V případě dimeru (ClOH)₂ zanikne jedna z jeho vodíkových vazeb a nová vodíková vazba se vytvoří mezi lineárním dimerem a ethylenem (schéma 3).

Jakkoli bylo příjemné, že se nám podařilo navrhnout možný mechanismus oxidace ethylenem, za důležitější ze širšího hlediska pokládám, že proces popsany schématem 2 je ilustrací katalýzy van der Waalsovou molekulou^{15*}. To je

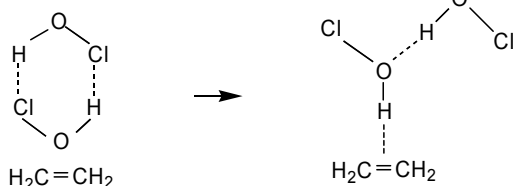


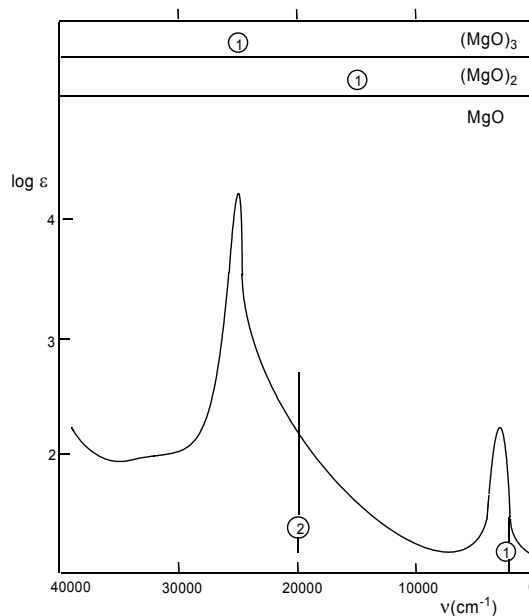
Schéma 3

v zásadě významné zejména proto, že jde o mechanismus, jenž se může dobře uplatňovat v kavitě při enzymatické

katalýze. Téma nepochybně aktuální při studiu klíčových procesů v živé hmotě.

5. Je oxid hořečnatý skutečně červený?

Takřka s jistotou lze říci ano, MgO je červený. Pokud jde o ten bílý prášek, který chemici dobře znají ze sbírek chemikálií, je vhodnější mu, v této rozporné situaci, připsat vzorec (MgO)₂. V souvislosti se studiem dvouatomových molekul¹⁶ sestávajících z atomů sloupce IIa a VIa jsme se rozhodli testovat kvantověchemické metody pro výpočet elektronických spekter u molekuly MgO. Výpočet se nám jevil jako očividně špatný: prvý intenzivní přechod byl nalezen ve viditelné oblasti a nejdouhovlnnější (méně intenzivní) elektronický přechod dokonce v oblasti u 4000 cm⁻¹, tedy v infračervené oblasti! Tedy v oblasti typické pro vibrační pohyby atomů v molekulách. V případě molekuly MgO činí valenční vibrace vazby Mg-O přibližně 800 cm⁻¹. Po marném hledání chyby ve výpočtovém programu a v našem zadání výpočtu jsme se museli smířit s tím, že výpočet je správný, i když nezbuzuje důvěru. Tato nedůvěra přešla v radost, když se podařilo nalézt



Obr. 6. Elektronické spektrum oxidu hořečnatého. Absorpční křivka je založena na kvantověchemickém výpočtu, úsečkami jsou vyznačeny pokusně pozorované dva absorpční pásy¹⁷, číselně označené 1 a 2. V horní části obrázku jsou naznačeny symbolem 1 vypočítané polohy prvního, tedy nejdouhovlnnějšího pásu pro dimer a trimer oxidu hořečnatého, (MgO)₂ a (MgO)₃

* O katalýze lze hovořit proto, že přistoupení další molekuly FOH k „původní“ molekule FOH nejen uskuteční proces jedinou molekulou neuskutečnitelný, ale též proto, že po ukončení sledu kroků uvedených ve schématu 2 se jedna molekula FOH vrací do dalšího oxidačního procesu. Tedy jeden z typických rysů katalytické reakce je splněn.

v literatuře pokusná data a ukázalo se, že vypočítané přechody odpovídají pokusným údajům. To je patrné na obr. 6, kde do absorpční křivky, odvozené z vypočítaných poloh a intenzit přechodů, byla vkreslena pokusná data¹⁷; kvalitativně vzato je shoda teorie s experimentem vynikající.

Ukázalo se, že výpočty elektronických spekter vedou u oxidů a sulfidů kovů ze skupiny IIa k pásům ve viditelné oblasti. Elektronický přechod v oblasti vibračních přechodů, nalezený u MgO, je dosti výjimečný. Dovoluje formulovat otázku směrem k teoretickým fyzikům: je přípustné použít za těchto okolností aproximaci běžnou u (téměř) všech kvantověchemických výpočtů molekul, aproximaci Bornovu-Oppenheimerovu, o oddělení elektronických a vibračních pohybů?

LITERATURA

1. Dunning T. H., Jr.: *J. Chem. Phys.* 90, 1007 (1989).
2. Čárský P., Urban M.: *Ab Initio Calculations. Methods and Application in Chemistry*. Lecture Notes in Chemistry, sv. 16. Springer-Verlag, Berlin, kap. 2.
3. Zahradník R., Šroubková L.: *Isr. J. Chem.* 43, 243 (2003).
4. Sandorfy C.: *Chem. Listy* 97, 182 (2003).
5. Hobza P., Zahradník R.: a) *Intermolecular Complexes*. Academia, Praha 1988. b) Hobza P., Zahradník R.: *Chem. Rev.* 88, 871 (1988). c) Hobza P., Zahradník R., Müller-Dethlefs K.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 71, 443 (2006). d) Zahradník R., Šroubková L.: *Int. J. Quantum Chem.* 104, 52 (2005).
6. Burda J. V., Zahradník R., Hobza P., Urban M.: *Mol. Phys.* 89, 425 (1996).
7. Merz K. M., Jr., Stanton R. V.: v *Encyclopedia of Computational Chemistry* (Ed.-in-Chief P. von R. Schleyer). Vol. 4, 2330. J. Wiley, Chichester 1998.
8. Zahradník R., Šroubková L.: *Helv. Chim. Acta* 86, 979 (2003).
9. Koutecký J., Zahradník R.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 25, 811 (1960).
10. a) Dembinski R., Bartik T., Bartik B., Jaeger M., Gladysz J. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 122, 1115 (2000) a práce tam citované. b) Sakurai A., Akita M., Morooka Y.: *Organometallics* 18, 3241 (1999).
11. Zahradník R., Hess B. A., Jr.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 55, 890 (1990).
12. a) Rozen S.: *Eur. J. Org. Chem.* 2433 (2005). b) Rozen S.: *Acc. Chem. Res.* 21, 307 (1988). c) Dunkelberg O., Haas A., Klapdor M. F., Mootz D., Poll W., Appelman E. H.: *Chem. Ber.* 127, 1871 (1994).
13. Beran S., Jirů P., Wichterlová B., Zahradník R.: *React. Kinet. Catal. Lett.* 5, 131 (1976).
14. Srnc M., Zahradník R.: neuveřejněné výsledky (2006).
15. Zahradník R.: *Chem. Listy* 76, 1009 (1982).
16. Srnc M., Zahradník R.: *Chem. Phys. Letters* 407, 283 (2005).
17. Dyke J. M., Feher M., Gravenon B. W. J., Moris A.: *J. Phys. Chem.* 91, 4476 (1987).

METODY PRVKOVÉ ANALÝZY VYUŽITELNÉ PRO RoHS

**MILOSLAV POUZAR a TOMÁŠ
ČERNOHORSKÝ**

Laboratoř prvkové analýzy, Ústav ochrany ŽP, Univerzita
Pardubice

<http://webak.upce.cz/spa>, milan.pouzar@upce.cz,
tomas.cernohorsky@upce.cz

Úvod

1. června 2006 vstupuje v platnost směrnice Evropského parlamentu a Rady Evropy 2002/95/EC s názvem „The Restriction of the Use of Certain Hazardous Substances in Electrical and Electronic Equipment Regulations“ známá pod zkratkou RoHS. Tato směrnice zakazuje po uvedeném datu uvádět na trh EU nová elektrická a elektronická zařízení, ve kterých obsah vyjmenovaných toxických prvků a látek přesahuje předepsané limitní hodnoty. Omezeno je používání kadmia (Cd), olova (Pb), rtuti (Hg), šestimocného chrómu (Cr^{VI}), polybromovaných bifenyly (PBB) a polybromovaných difenyletherů (PBDE). Limitní hodnoty koncentrací dané normou jsou shrnuty v tab. I. Limitován je obsah prvku (látky) v homogenním materiálu. Za homogenní je považován takový materiál, který není možné mechanicky rozpojit na další různé materiály. Mezi operace mechanického rozpojování patří zejména šroubování, sekání, drcení, mletí a abrazivní procesy. Mezi homogenní materiály patří např. jednotlivé typy plastů, keramiky, skla, kovů a kovových slitin, papíru a lepenky, gumy a nátěrů. V případě kabelu bude pak limit platit zvlášť pro izolátor a zvlášť pro kovové jádro, protože kabel nelze ve smyslu RoHS považovat za homogenní materiál. Nejčastější oblasti použití limitovaných prvků a látek v elektrotechnickém průmyslu jsou shrnuty v tab. II.

Tabulka I
Limitní hodnoty koncentrací prvků a látek regulovaných RoHS

Prvek (látky)	Limit [%]	Limit [ppm] nebo [mg kg^{-1}]
Kadmium (Cd)	0,01	100
Rtut' (Hg)	0,1	1 000
Šestimocný chróm (Cr^{VI})	0,1	1 000
Polybromované bifenyly (PBB)	0,1	1 000
Polybromované difenylethery (PBDE)	0,1	1 000

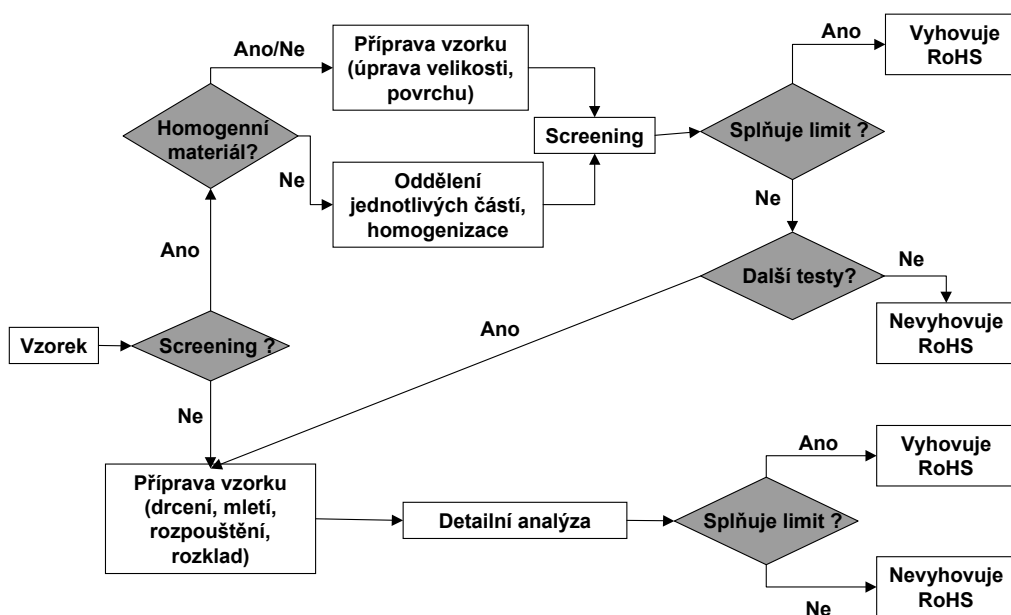
Tabulka II
Oblasti použití prvků a látek regulovaných RoHS

Prvek/Látka	Použití
Cd	baterie, pigmenty – zejména žluté a fosforeskující, aditiva do plastů (PVC – kabely, sáčky z recykl. PE), LED
Hg	spínače, pigmenty, nátěry, polyuretanové komponenty (vysoce lesklá okna), lampy, žárovky/osvětlení (displeje, skenery, projektory)
Cr^{VI}	antikoroziční ochrana kovů, pigmenty
PBB a PBDE	zpomalovače hoření (plasty – kryty, kabely, konektory, ventilátory, součást nátěrů)
Pb	pájky, baterie, pigmenty, piezoelektrická zařízení ^a , zátavová skla, CRT skla ^a , PVC kabely (UV/tepelná stabilizace)

^a Vyjmenovaná výjimka z RoHS

Strategie analytického procesu

Chemická analýza pro potřeby RoHS je do značné míry komplikována rozmanitostí materiálů, které spadají do oblasti působnosti uvedené normy. Na trhu je dostupná celá řada technik, které jsou schopné s dostatečnou přesností analyzovat vyjmenované prvky (látky). Tyto techniky se liší jak pořizovací cenou, tak i provozními náklady, nároky na úpravu vzorku, citlivostí, aplikovatelností na různé typy materiálů, nároky na kvalifikaci obsluhy, celkovou cenou analýzy a dalšími parametry. Volba analytického postupu bude v neposlední řadě ovlivněna počtem zpracovávaných vzorků, požadavky na rychlost a přesnost analýzy, konkrétním typem analyzovaného materiálu apod. Snaha o racionální vedení analytického procesu může vést např. k postupu znázorněnému na obr. 1. Toto schéma rozděluje analytické techniky na screeningové a detailní. Hlavní předností screeningových technik je jejich rychlost, malé nároky na úpravu vzorku, nedestructivnost a nízká cena analýzy. Tyto techniky se mohou dopustit falešně pozitivní identifikace (nadhodnocení koncentrace některého z prvků), ale neměly by nevyhovující vzorek označit za vyhovující. Vzorek musí být po screeningu použitelný pro další stanovení. V případě, že nelze na základě screeningu učinit jednoznačný závěr o tom, zda daný vzorek splňuje předepsaný limit či nikoli, je třeba přistoupit k detailní analýze. Zde se aplikují techniky, pro něž je charakteristická vysoká citlivost, přesnost a jednoznačnost výsledku (např. měříme pouze Cr^{VI} a nikoli celkový Cr). Detailní



Obr. 1. Strategie analytického procesu

Tabulka III
Aplikace jednotlivých technik při analýze pro potřeby RoHS

Látka/ prvek	Analytická metoda	
	screening	detailní analýza
Olovo (Pb)	ED XRF – energiově-dispersní rentgen- fluorescenční spektrometrie WD XRF – vlnově-dispersní rentgen- fluorescenční spektrometrie	ICP OES – optická emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem ICP MS – hmotnostní spektrometrie s indukč- ně vázaným plazmatem AAS – atomová absorpční spektrometrie
Kadmium (Cd)	ED XRF – energiově-dispersní rentgen- fluorescenční spektrometrie WD XRF – vlnově-dispersní rentgen- fluorescenční spektrometrie	ICP OES – optická emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem ICP MS – hmotnostní spektrometrie s indukč- ně vázaným plazmatem AAS – atomová absorpční spektrometrie
Rtuť (Hg)	ED XRF – energiově-dispersní rentgen- fluorescenční spektrometrie WD XRF – vlnově-dispersní rentgen- fluorescenční spektrometrie	AAS (plamenová AAS nebo metoda stude- ných par) termooxidační stanovení
Šestimocný chróm (Cr ^{VI})	ED XRF a WD XRF (stanovení celkového Cr) kolorimetrické stanovení Cr ^{VI} ve vodě („Pack test“)	iontová chromatografie spektrofotometrie (difenylkarbazid)
PBB, PBDE	ED XRF a WD XRF (stanovení celkového Br) FTIR – infračervená spektrometrie s Fouriero- vou transformací	GC-MS – plynová chromatografie s hmotnost- ní spektrometrií

techniky jsou obvykle náročnější na přípravu vzorku (extrakce, mikrovlnná mineralizace), na dobu analýzy, na kvalifikaci obsluhy a obvykle jsou i dražší. Použitelnost

jednotlivých technik při screeningu a detailní analýze jednotlivých prvků (látek) pro potřeby RoHS je shrnuta v tabulce III.

Ze života společnosti

Zasedání hlavního výboru České společnosti chemické a *Cena Shimadzu 2006*

Dne 22. listopadu 2006 proběhlo v prostorách jezuitského konviktu na půdě Univerzity Palackého v Olomouci zasedání hlavního výboru ČSCH. Setkání organizovala olomoucká pobočka společnosti. V úvodu zasedání přednesl doc. Jaroslav Vičar z Ústavu lékařské chemie a biochemie, LF UP referát o doc. Karlu Bláhovi u příležitosti jeho nedožitých 80. narozenin. Předsedkyně společnosti prof. Jitka Ulrichová poděkovala Ing. Janu Šimánkovi a Ing. Markétě Bláhové, kteří ze Společnosti odešli, za skvělou práci.

Poté představil Ing. Pavel Gerla profil firmy Vitrum s.r.o, která se stala novým kolektivním členem ČSCH.



Předávání Ceny Shimadzu (zprava prof. Jitka Ulrichová, prof. Lubomír Dvořák, Ing. Robert Kaubek, Tetsuro Kai)



Ing. Markéta Bláhová



Prof. Šesták hovoří o aktivitách odborné skupiny Termická analýza

Kolektivní členové a spolupracující organizace (vysoké školy, ústavy akademie věd, průmyslové podniky a firmy zabývající se prodejem chemikálií a laboratorního vybavení) pomáhají při organizování a financování aktivit společnosti. Zástupci místních poboček a odborných skupin podali informace o svých aktivitách v uplynulém roce. Skutečným oživením mezi nimi byla přednáška prof. Jaroslava Šestáka, který hovořil o práci odborné skupiny „Termická analýza“. V závěru byla prof. Vilímem Šimánkem podána první informace o pořádání jubilejního 60. sjezdu asociací českých a slovenských chemických společností v Olomouci ve dnech 1.–4. září 2008. V podvečer měli účastníci zasedání možnost prohlídky Arcidiecézního muzea.

Ve čtvrtek 23.11.2006 byla v reprezentačních prostorách rektorátu UP předána *Cena Shimadzu*. Tuto cenu vyhlašuje japonská firma Shimadzu ve spolupráci s ČSCH od roku 1999. Je udělována mladým vědeckým pracovníkům do 35 let za původní vědeckou práci z oboru analytické chemie. Cena byla udělena RNDr. Janu Petrovi z Katedry analytické chemie, PŘF UP za práci: „On-line prekoncentrace slabých elektrolytů pomocí elektrokinetické akumulace kapilární elektroforézou“. Podle zástupce firmy Shimadzu Dr. T. Petříka ocenila komise především aplikační dopad vítězné práce.

P. Tarkowski

Oslavy na ústecké univerzitě

V uplynulých týdnech proběhly na ústecké univerzitě oslavy dvou výročí. Nejprve slavila univerzita 15 let od svého založení. Dne 28.9.1991 se tehdejší ústecká Pedagogická fakulta transformovala na Univerzitu Jana Evange-



Foto: Z. Kolská

listy Purkyně (dále jen UJEP) za současného vzniku Fakulty životního prostředí a Fakulty sociálně ekonomické. Součástí oslav byl i Týden vědy a umění na UJEP ve dnech 9.–13.10.2006. Při této příležitosti bylo uděleno 11 medailí UJEP za významný podíl na rozvoji univerzity a proběhly různé akce za přítomnosti představitelů města, kraje i jiných českých a zahraničních vysokých škol.

V dnešní době má ústecká univerzita již 7 fakult a 2 ústavy. A právě jedna z fakult, Přírodovědecká fakulta (PřF), oslavila 4. listopadu své první narozeniny. Oslavy výročí založení PřF vyvrcholily Dnem otevřených dveří v sobotu 4.11.2006.

Program obou výše zmíněných akcí u příležitosti oslav byl na PřF pro příchozí velmi bohatý a každá z kateder se snažila zaujmout veřejnost a ukázat svůj obor v příznivém a lákavém světle. Návštěvníci tak mohli strávit na fakultě příjemné dny plné různých akcí. Na katedrách probíhaly semináře, popularizační přednášky, byly otevřeny a zpřístupněny všechny pracovní, počítačové učebny, skleník s výstavou masožravých rostlin i laboratoře. I katedra chemie PřF se prezentovala řadou aktivit. Snažili jsme se tak přesvědčit veřejnost, že chemie není pouze zapáchající věda ohrožující zdraví lidí a životní prostředí v našem městě. Kromě již výše zmíněných seminářů a popularizačních přednášek byla např. promítána řada videopořadů a výukových programů zabývajících se různými oblastmi chemie (výrobou kyseliny sirové, pryskyřic, významem chloru, chemiluminiscencí, apod.), které vznikly na této katedře. Probíhaly ukázky stanovení těžkých kovů v rostlinném a biologickém materiálu. Největší úspěchy zaznamenaly demonstrace zajímavých chemických pokusů, které předváděli studenti a budoucí učitelé chemie. Posluchárna katedry chemie PřF byla vždy zcela zaplněna zájemci různých věkových kategorií.

Zdeňka Kolská

Prestižní světové i domácí ocenění uděleno profesoru Miloslavu Frumarovi z Fakulty chemicko-technologické Univerzity Pardubice

Prestižní mezinárodní cenu Stanforda R. Ovshinského, která je udělována nejvýznamnějším vědcům světa za dlouhodobé vynikající výsledky v oblasti výzkumu nekrystalických chalkogenidů, a národní cenu Hanušovu medaili získal letos vědec a pedagog – prof. Ing. Miloslav Frumar, DrSc. z Univerzity Pardubice, Katedry obecné a anorganické chemie a Výzkumného centra Nové perspektivní materiály Fakulty chemicko-technologické.

Cena S. R. Ovshinského byla udělena prof. M. Frumarovi při příležitosti konference E*PCOS 2006 – European Symposium on Phase Change and Ovonic Science, která se letos konala ve francouzském Grenoble 29.–31. května 2006 a kde profesor Miloslav Frumar přednesl přednášku s názvem „Krystalické a amorfní chalkogenidy – složení, struktura, vlastnosti a fázové změny“. Tímto významným oceněním byl mezinárodně uznán přínos prof. M. Frumara. Profesor Frumar se tak zařadil k významným vědcům v oboru, kteří toto ocenění získali již dříve, jako např. prof. K. Tanaka (University of Sapporo) z Japonska, S. R. Elliott (University of Cambridge) z Velké Británie, V. Ljubin (Negev University) z Izraele, A. Kolobov (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tsukuba) z Japonska.

Dne 28. září 2006 byla udělena prof. Ing. Miloslavu Frumarovi, DrSc. z rukou předsedkyně České společnosti chemické (ČSCH) prof. RNDr. Jitky Ulrichové, CSc. Hanušova medaile, a to při slavnostní večeři pořádané při příležitosti konání 7. mezinárodní konference „Solid State Chemistry, SSC 2006“ v prostorách pardubického zámku.

Hanušova medaile je nejvyšším vyznamenáním České společnosti chemické, udělované od roku 1966 za zásluhy o rozvoj chemie jako oboru v kterémkoliv její oblasti.

Hanušova pamětní medaile je každoročně udělována významným domácím a zahraničním vědeckým pracovníkům. Mezi vyznamenanými byli např. ze zahraničí prof. V. Prelog, prof. L. Ruzicka ze Švýcarska nebo prof. A. Bader z USA a z domova prof. J. Heyrovský, prof. A. Okáč, akad. F. Šorm, prof. E. Hála, prof. J. Koryta a dále z naší university prof. J. Klikorka, prof. J. Churáček, prof. J. Holeček, prof. P. Jandera a prof. K. Vytřas.

Profesor Frumar se již 45 let věnuje výzkumu v oblasti chemie pevných látek a anorganických materiálů. V této oblasti je považován domácí i mezinárodní vědeckou komunitou za zakladatele tzv. „pardubické školy“. Jeho vědecká škola je světově uznávána zejména v oblasti krystalických a amorfních polovodičů. Profesor Frumar a jeho studenti a spolupracovníci přispěli fundamentálními příspěvky k porozumění fotoindukovaných a fotostrukturních změn a k pochopení fyzikálně-chemických vlastností amorfních chalkogenidů. Tyto jevy jsou základem řady technologických aplikací při vývoji a výrobě pamětí, mikrooptických obvodů, dále opticky a elektricky indukovaných fázových změn vhodných pro



Profesor Frumar, oceněný Hanušovou medailí, spolu s předsedkyní České společnosti chemické prof. Ulrichovou a prof. Wágnerem, předsedou organizačního výboru mezinárodní konference SSC 2006 v září na pardubickém zámku

přípravu tzv. netěkavých pamětí. Spolu se svými spolupracovníky také přispěl k porozumění a popisu mechanismu opticky indukovaného rozpouštění a difúze stříbra v amorfních chalkogenidech, které jsou nebo budou potenciálně využitelné k přípravě optických obvodů, mřížek, mikročoček pro infračervenou oblast spektra a také netěkavých pamětí.

V oblasti průmyslových aplikací dále zaměřil svou vědeckou pozornost na luminiscenční vlastnosti krystalických práškových materiálů a amorfních tenkých vrstev halogenidů a chalkogenidů, na tlustovrstvé odporové vrstvy na bázi ruthenia a v poslední době se věnoval studiu jevů a materiálů spojených s luminiscencí prvků vzácných zemin dotovaných v chalkogenidových sklech a novým materiálům vhodným pro netěkavé paměti. Profesor Frumar vedl též výzkumné práce na projektech pro průmyslové podniky.

Profesor Frumar je autorem a spoluautorem více než 300 prací v mezinárodních a národních časopisech a knihách abstrahovaných v „Chemical Abstracts“, dále řady přehledných článků, z nichž více než 200 prací je v mezinárodních časopisech a knihách. Je rovněž autorem 19 patentů, několika set prací prezentovaných na mezinárodních konferencích, z nichž několik desítek tvoří zvané přednášky. O uznání jeho vědecké školy svědčí i četná členství v mezinárodních výborech vědeckých konferencí po celém světě – letos (2006) např. 15. ročníku mezinárodního symposia neoxidických skel „International Symposium on Non-Oxide Glasses“ v indickém Bangalore a 7. mezinárodní konference chemie pevných látek „Solid State Chemistry“ v Pardubicích. Od roku 1992 je předsedou odborné skupiny anorganické chemie České společ-

nosti chemické. Přednáší též na prestižních zahraničních univerzitách a výzkumných institucích, např. Princeton University, University Gottingen, Pennsylvania State University, University of Jena a řada dalších. Díky jeho kontaktům v mezinárodní vědecké komunitě většina jeho mladších spolupracovníků a studentů absolvovala dlouhodobé zahraniční pobyty na vyhlášených zahraničních univerzitách.

Během své odborné kariéry působil v řadě poradních orgánů, vědeckých radách, radách mezinárodních časopisů, ale též v řídicích funkcích katedry obecné a anorganické chemie. Stal se opravdovým průkopníkem v zakládání výzkumných oddělení ve spolupráci s dalšími výzkumnými ústavy a ve spolupráci se zahraničními pracovníky. V 80. letech se významně podílel na vytvoření Společné laboratoře chemie pevných látek tehdejší Vysoké školy chemicko-technologické a ČSAV, dnes Univerzity Pardubice a Ústavu makromolekulárních látek AV ČR. V roce 2000 stál u zrodu Výzkumného centra „Nové a perspektivní anorganické materiály a sloučeniny“, které velmi úspěšně vedl a vede po celou dobu jeho trvání. V současné době působí jako vedoucí Výzkumného centra „Perspektivní anorganické materiály“, navazujícího svým vědeckým záběrem na předešlé, společného pracoviště Univerzity Pardubice a Ústavu anorganické chemie AV ČR.

Za svou obětavou a novátorskou práci byl oceněn řadou vyznamenání a cen. Např. v roce 1985 byl odměněn státní cenou za výzkum v oblasti chemie amorfních polovodičů, v roce 1994 cenou Vědecko technické společnosti, v roce 2000 Pamětní medailí Univerzity Pardubice, v roce 2002 byl jmenován francouzskou vládou rytířem Akademické palmy a v roce 2004 Medailí za zásluhy o Univerzitu Pardubice.

Cena S. R. Ovshinského a Hanušova medaile jsou dalšími prestižními oceněními jeho celoživotního působení v oblasti vědy i pedagogické práce, které věnoval prof. Frumar celý svůj aktivní pracovní život. Prof. Frumar nepochybně pozitivně přispívá k rozvoji chemie a v oblasti návrhů potenciálních aplikací realizovaného výzkumu. Jeho výsledky a publikované práce mají významný vliv na rozvoj řady oblastí chemie pevných látek a materiálů.

Dne 18. července oslavil prof. Ing. Miloslav Frumar, DrSc. významné životní jubileum – 70 let – a letos je to též již 45 let, co aktivně působí na půdě pardubické vysoké školy, dříve Vysoké školy chemicko-technologické v Pardubicích, dnes Univerzity Pardubice.

Srdečně blahopřejeme.

za kolektiv pracovníků Katedry obecné a anorganické chemie a Výzkumného centra FChT prof. Ing. Tomáš Wágner, CSc.



VŠCHT Praha udělila čestný doktorát prof. Antonínu Holému

Vědecká rada Vysoké školy chemicko-technologické na svém zasedání dne 5. 10. 2006 vyjádřila jednomyslný souhlas s návrhem rektora na udělení čestné hodnosti doktor honoris causa prof. RNDr. Antonínu Holému, DrSc., d.h.c. Tato

hodnost je udělována významným domácím a zahraničním osobnostem, které výrazně přispěly k rozvoji oblastí, které tvoří zaměření a dlouhodobou orientaci VŠCHT Praha. Slavnostní promoce se konala dne 6. 11. 2006 v Betlémské kapli.

Úvodní slovo rektora VŠCHT Praha prof. Ing. Vlastimila Růžičky, CSc.

Magnifici, spectabiles, honorabiles, vážení členové akademické obce, dámy a pánové,

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze si zakládá na tom, že je náročnou vysokou školou. Tomu odpovídají nemalé nároky kladené na studenty bakalářského, inženýrského i doktorského stupně studia. Na udělování čestných doktorátů je pak VŠCHT Praha doslova skoupá, poslední udělila před devíti lety v roce 1997.

Dimenze titulu doctor honoris causa jsou ovšem zcela jiné, než hodnosti udělované na základě úspěšného zakončení studia, vědecké práce či pedagogické a publikační činnosti. Ke složení takového doktorátu se nemůžete přihlásit, neexistují konkrétní přijímací ani závěrečné zkoušky, ani institut obhajoby. Z hlediska časového i obsahového je titul doctor honoris causa oceněním mnohem vyššího řádu.

Vážený pane profesore Holý, Vysoká škola chemicko-technologická si Vás cení jako člověka, který desítky let zasvětil své vášni pro chemii a který výsledky své vědecké práce dokázal široce prakticky aplikovat. V tomto smyslu není dnešní čestný doktorát jen oceněním Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, ale symbolickým poděkováním 300 milionů pacientů, kteří se potýkají s Hepatitidou B a kterým jste přinesl lék, je poděkováním nemocných AIDS na celém světě, kterým jste dokázal výrazně zvýšit kvalitu života, je nespočitatelným poděkováním těch, které léčily a léčí Vaše protizánětlivé a protinfekční preparáty.

Vaše badatelské úspěchy, vážený pane profesore, a jejich aplikace, nesmírně pomáhají popularizovat chemii a posunovat její vnímání od negativních zakořeněných předsudků minulých let směrem k vnímání chemie jako moderní disciplíny, která přináší do našeho každodenního života pozitivní prvky. V oblasti lidského zdraví jsou tyto efekty obzvláště markantní. V tomto smyslu jste nepochybně vyslancem a popularizátorem chemie. I to je di-

menze dnešního čestného doktorátu, i za to Vám náleží mé upřímné poděkování.

Čestný doktorát, vážený pane profesore, Vám VŠCHT Praha uděluje také jako členu Akademie věd České republiky, vědci, který se zabývá obory, jež se pěstují i na VŠCHT Praha. Pro nás ve škole jsou výsledky Vaší práce velmi inspirující. Přijměte, prosím, dnešní ocenění i jako symbol spolupráce a propojení našich mateřských institucí.

Řeknu, vážený pane profesore, co Vy byste nikdy ve své skromnosti nevyslovil. Jste považován za jednoho z nejslavnějších českých chemiků současnosti, jste členem Učené společnosti ČR, nositelem cen od Tokia a Spojených států amerických po Evropskou unii. Netroufám si tady učinit kompletní výčet Vašich úspěchů a aktivit, byl by totiž nesmírně obsáhlý.

Vážený pane profesore Holý, nedokázal bych dnes nalézt nikoho jiného, komu by titul doctor honoris causa Vysoké školy chemicko-technologické v Praze měl náležet více, než Vám.

Laudatio přednesené děkanem FCHT prof. Ing. Alešem Helebrantem, CSc., na základě podkladů od prorektorky VŠCHT Praha prof. Ing. Jitky Moravcové, CSc.

Vaše magnificence, magnifici, spectabiles, honorabiles, vážená obci akademická, vzácní hosté, dámy a pánové,

je mi velkou ctí, že mohu na tomto slavnostním zasedání vědecké rady představit osobnost profesora doktora Antonína Holého, doktora věd.

Antonín Holý se narodil 1. září 1936 v Praze. Traduje se, že v osmi letech nalezl s kamarádem na půdě starou učebnici chemie z dob císařsko-královského gymnasia, kde ho upoutaly zejména doprovodné ilustrace znázorňující pokusy, různé tyglíky a křivule. Tato náhoda rozhodla o dalším osudu malého chlapce, který zahořel pro chemii a toto zaujetí mu vydrželo až do dnešních dnů. Po maturitě na gymnasiu v Karlíně nastoupil na Universitu Karlovu, kde v roce 1959 dokončil studium organické chemie na Matematicko-fyzikální fakultě.

Významným rokem byl rok 1960. Jednak se Antonín Holý vrátil z vojenské služby, jednak nastoupil vědeckou aspiranturu na Ústavu organické chemie a biochemie pod vedením dr. Arnolda a rovněž se oženil. Manželka Ludmila je absolventkou naší vysoké školy v oboru chemie a technologie sacharidů. Společně vychovali dvě dcery.

Profesor Holý zůstal věrný Ústavu organické chemie a biochemie, kam nastoupil v roce 1963 jako vědecký pracovník. Postupně byl jako vedoucí vědecký pracovník vedoucím skupiny chemie nukleových kyselin, vedoucím stejnojmenného oddělení až se v letech 1994–2002 stal ředitelem ústavu. Vědecký titul doktor věd získal v roce 1984. Věrný zůstal i chemii složek nukleových kyselin jako svému hlavnímu vědeckému zájmu. Stěží se na celém světě najde chemik zabývající se přírodními látkami, který by spíše dříve než později nepřišel do styku s některou

publikací profesora Holého. K jeho nejvýznamnějším úspěchům v aplikované chemii v minulých letech patří původní antiherpetikum DUVIRAGEL, které bylo vyráběno podnikem Léčiva Praha (nyní Zentiva), nebo originální postup přípravy azidothymidinu pro Lachemu Brno.

Profesor Holý je nejen špičkový světový odborník v oboru chemie složek nukleových kyselin, ale jeho práce má i mimořádné praktické aspekty v celém oboru medicíně chemie. Systematický, stručně přesný, cílevědomý, plně pohlcený experimentální prací či diskusí jejich výsledků. Těmito vlastnostmi proslul již při studiu na Karlově univerzitě a jakoby přirozeně stejné vlastnosti očekává u svých spolupracovníků. Obdivovaný zahraničními profesory, kteří se udiveně ptávali ještě za dob Československé akademie věd „*Je to pravda, že všechny látky uváděné v publikacích vaří sám se svojí laborantkou?*“

Šťastným rokem byl rok 1976, kdy na sympoziu v Göttingenu se Antonín Holý, chemik z Prahy, setkal s mladým lékařem z virologického ústavu Katolické university v belgickém Leuvenu, Erikem de Clercqem. Toto setkání navždy změnilo běh života obou vědců. Z diskuse vzešel návrh na testování připravených nových derivátů a analogů nukleosidů a nukleotidů na protivirovou aktivitu. Od té doby putují vzorky z Prahy do Belgie a zpátky se vracejí výsledky systematického testování. Tato spolupráce byla a je výjimečně úspěšná. Přinesla zásadní nové poznatky do studia vztahu struktura látky – biologická aktivita a otevřela nové perspektivy před medicínskou chemií. Jejich výsledky byly převzaty a rozvíjeny i na renomovaných zahraničních pracovištích a za posledních zhruba 10 let inspirovaly na 1400 vědeckých prací. Poté, co do spolupráce vstoupila jako třetí strana americká farmaceutická firma Gilead, vyústila až do praktické realizace výroby léků, které pomáhají stovkám milionů lidí na celém světě. K nejvýznamnějším úspěchům patří antivirové preparáty VISTIDE, VIREAD a HEPSERA. Vistide schválený pro klinické použití v USA v roce 1996 se používá proti virovému zánětu oční sítnice a je účinný i proti herpetickým a papilomavirovým infekcím. Lék Hepsery byl schválen v USA na podzim roku 2002 jako lék proti virové hepatitidě typu B, kterou trpí na celém světě zhruba 300 milionů pacientů. Inhibitor reversní transkriptasy viru HIV Viread schválený v USA v roce 2001 je v současnosti jedním z neúčinnějších léků proti AIDS, významně zvyšuje kvalitu života pacientů a stal se nadějí milionů HIV pozitivních pacientů na celém světě. Používání preparátu Viread je schváleno v mnoha státech světa včetně Evropské unie a Japonska. Kombinace preparátu Viread s emtricitabinem, byla schválena pod názvem Truvada v roce 2004.

V rámci své odborné aktivity vychoval profesor Holý řadu vědeckých pracovníků, přednášel a přednáší na University Palackého v Olomouci, na 3. Lékařské fakultě University Karlovy a na řadě zahraničních universit a pracovišť. Vede diplomové práce studentů University Karlovy a naší vysoké školy. V roce 2004 byl prezidentem republiky na návrh vědecké rady University Palackého v Olomouci jmenován profesorem organické chemie.

Vědecká práce profesora Holého zahrnuje více než

550 publikací, 60 patentů a několik knih. Počet citací na jeho práce přesahuje 7 500, což je číslo v České republice naprosto mimořádné a řadí profesora Holého k nejúspěšnějším světovým chemikům. V této souvislosti bych se rád zmínil i o jeho dlouhodobé péči o časopis Collection of Czechoslovak Chemical Communications, ve kterém tradičně publikuje valnou část svých prací. Je jistě i jeho přičiněním, že odborné renomé tohoto časopisu stoupá, jak ostatně lze dokumentovat i na zvyšujícím se tzv. impact faktoru.

Mimořádné výsledky profesora Holého na poli organické a medicínské chemie nezůstaly utajeny a byly pozasluzně odměněny řadou národních a mezinárodních cen a ocenění. Jmenovat mohu Čestnou plaketu za zásluhy o mezinárodní časopis Nucleic Acids Chemistry, Čestnou medaili National Cancer Institute, Tokyo, Státní cenu za chemii za práci?? "Acyklická analoga nukleosidů a nukleotidů", Hanušovu medaili České společnosti chemické, Čestný doktorát University Palackého v Olomouci a University v Gentu, Medaili "Za zásluhy" udělenou prezidentem České republiky v roce 2003, Cenu Praemium Bohemiae z roku 2004, Medaili Akademie věd ČR „De scientia et humanitatis optime meritis“ a Medaili "Za zásluhy" Přírodovědecké fakulty UK v Praze. Je rovněž členem Učené společnosti České republiky. Omlouvám se, pokud jsem na některou z cen ve výčtu pozapomněl.

V letošním roce oslavil profesor Holý životní jubileum, stále je vědecky činný a sám experimentuje v laboratoři. Americká firma Gilead mu letos udělila čestnou profesuru tzv. „distinguished chair“, v rámci které bude financovat další výzkum týmu profesora Holého.

Profesor Holý je chemikem světového věhlasu a jedním z českých chemiků, kteří se věnují své práci ve své vlasti a přispívají tak nemalou měrou k tomu, že česká chemie má stále svoje dobré jméno. Můžeme mu jen poděkovat a popřát do další práce pevné zdraví, neutuchající elán a mnoho úspěchů.

Projev prof. RNDr. Antonína Holého, DrSc.

Vaše Magnificence pane rektore, magnificence paní a páni rektori a prorektori, spectabiles paní děkani, honorabilis paní promotorko, honorabiles paní a páni profesori, vážení přítomní, dámy a pánové:

Dovolte mi, prosím, vyjádřit Vám svůj opravdu upřímný a veliký dík za čest, kterou mi Vysoká škola chemicko-technologická v Praze dnes prokazuje udělením svého doktorátu honoris causa. Víím, jak vzácná je taková událost. Do prapředka našeho tehdejšího Chemického ústavu si před více než padesáti lety profesor Šorm z Katedry lučebnin organických a výbušnin, jak se poválečná organika jmenovala, přivedl samozřejmě především své spolupracovníky. V dnešní terminologii by náš dnešní ÚOCHB byl jakýmsi tehdejší spin-off produktem VŠCHT. Málokdo si uvědomuje, že vzniklou monolitní stavbu ústavu začala narušovat teprve naše generace, a to

až v druhé dekádě jeho existence. Ale vzájemná spřízněnost duší přetrvává. Doufám, že duchovní spojení obou pracovišť nebude narušeno právě zahájenou stavbou ústřední knihovny, která nepochybně znemožní přímý optický kontakt.

Nedávno jsem při jiné příležitosti sezval veškeré své bývalé i současné diplomanty, aspiranty a doktoranty. Bylo jich přes dvacet. Naprostá většina z nich jsou bývalí absolventi VŠCHT, Všichni byli a zůstali vynikající. Tahle skutečnost nemůže být náhodná – a za to Vám vzdávám hold.

Budeme ale tak vysokou úroveň schopni zachovat? Obávám se, že při současném volání po masovosti vysokoškolského vzdělání to snadné nebude. Každý se o něj má právo pokusit, ale získat ho smějí výhradně ti nejlepší. Máte v rukou odbornou výchovu naší inteligence i bu-

doucnost téhle společnosti. Vzdělání si může vážit jen vzdělaný národ. Přeji Vám, abyste dokázali vzdorovat všem pokusům posuzovat kvalitu vzdělání všelijakými impakty, faktory H, a podobně. Abyste nepodléhali populistickým prohlášením o nutnosti zvýšit procentuální zastoupení vysokoškolsky vzdělané pokud možno celé populace, a to za každou cenu.

Ať už tohle zadání přichází ze samotného Bruselu či dokonce z MŠMT, vždycky to bude pouhá zástěrka před pokusy odsunout o pouhých několik málo let řešení neřešitelného a jeho důsledků. Z toho vyplývající nezbytné snížení kvality by byla cesta do pekel. Čínské přísloví praví výstižně “Pět bubnů nenahradí jeden zvon.” V tomto duchu přeji nám všem do budoucnosti co nejméně chaotického technokraválu a co nejvíc melodického hlasu zvonů. Děkuji Vám za pozornost.

Odborná setkání

37. Zasedání Divize analytické chemie Evropské asociace pro chemické a molekulární vědy (Division of Analytical Chemistry of the European Association for Chemical and Molecular Science)

37. výroční zasedání DAC EuCheMS proběhlo 25. června 2006 v Moskvě v návaznosti na „International Congress on Analytical Sciences“. Zúčastnili se ho zástupci 17 evropských chemických společností ze 14 evropských zemí. Na programu byly otázky související s činností DAC, příprava analytické sekce na prvním Evropském chemickém kongresu v Budapešti v srpnu 2006, příprava konference EUROANALYSIS XIV, která proběhne 9.–14. září 2007 v belgických Antverpách, příprava konference EUROANALYSIS XV, která se v roce 2009 bude konat v rakouském Innsbrucku a příprava řady dalších odborných setkání probíhajících pod záštitou DAC EuCheMS. Delegáti byli vyzváni k podávání žádostí o pořádání konference EUROANALYSIS XVI v roce 2011. Podrobně byl diskutován další rozvoj „Eurocurricula“ analytické chemie a jeho koordinace s projekty Evropské unie TUNING a ECTN zaměřenými na sladování bakalářských a nyní i magisterských a doktorských studijních programů v oblasti chemie. V této oblasti zřejmě stojí poměrně náročné úkoly i před českou analytickou chemií.

Účast zástupce České společnosti chemické na práci DAC FECS byla umožněna jednak grantem Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu INGO LA 273(2006) (reprezentace české analytické chemie v Evropské asociaci pro chemické a molekulární vědy) a jednak laskavou podporou firem Merck s.r.o. Praha a ChromSpec, Praha. Je milou povinností autora poděkovat výše uvedeným firmám za jejich pochopení a podporu aktivit České společnosti chemické a odborné

skupiny analytické chemie. Všechny materiály související s činností DAC EuChEMS jsou k dispozici na níže uvedené adrese.

*Jiří Barek,
zástupce České společnosti chemické v DAC EuCheMS
Katedra analytické chemie PřF UK, Albertov 2030,
128 43 Praha 2, tel: 221 951 224,
Barek@natur.cuni.cz*

ESEAC 2006

Ve dnech 11.–15. června 2006 proběhla na National School of Chemistry and Physics v Bordeaux již 11. mezinárodní konference o elektroanalýze organizovaná Evropskou společností pro elektroanalytickou chemii (European Society for ElectroAnalytical Chemistry – ESEAC). 4 plenární přednášky (Martin, Delamarche, Heller a Mascini) a 5 klíčových přednášek (Arbault, McPherson, Rossier, Gorton a Leech) přednesených špičkovými odborníky v elektroanalytické chemii poutavým způsobem seznámilo účastníky s moderními trendy v elektroanalytické chemii. Na ně navázalo více než 60 kvalitních ústních sdělení rovnoměrně zaměřených na různé, dynamicky se rozvíjející oblasti elektroanalytické chemie a více než 300 posterů. Celkově konference dokumentovala rostoucí aktivitu vědecko-výzkumných pracovníků v oblasti elektroanalytické chemie. Zvláště potěšující bylo neobyčejně vysoké procento mladých účastníků a jejich aktivita při ústních sděleních i při prezentaci posterů. Zájemci o konferenční materiály mohou kontaktovat autora tohoto článku, jehož účast na konferenci byla umožněna jednak grantem Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu INGO LA 273 (2006) (reprezentace české analytické chemie v Evropské asociaci pro chemické a molekulární vědy) a jednak laskavou podporou firem Merck s.r.o.

Praha a ChromSpec, Praha. Autor jim touto cestou děkuje za jejich pochopení a podporu aktivit České společnosti chemické a odborné skupiny analytické chemie. Pro české elektroanalytické chemiky bude jistě zajímavá informace, že příští konference ESEAC 2008 se bude konat v červnu 2008 v Praze.

*Jiří Barek,
zástupce České společnosti chemické v DAC EuChemS
Katedra analytické chemie PřF UK, Albertov 2030,
128 43 Praha 2,
tel. 221 951 224, Barek@natur.cuni.cz*

17. Mezinárodní kongres chemického a procesního inženýrství CHISA 2006

Ve dnech 27. až 31. srpna 2006 se v Praze konal již 17th International Congress of Chemical and Proces Engineering CHISA 2006. Kongres je bezesporu jednou z nejvýznamnějších akcí v oboru ve světovém měřítku a má dlouholetou tradici: jeho první ročník se konal v Brně v r. 1962, dva následující v letech 1965 a 1969 v Mariánských Lázních a od r. 1972 se kongres koná vždy v Praze, nejprve ve tříletém, později ve dvouletém intervalu. Je zajímavé, že v době, kdy většina významných vědeckých konferencí stále mění místo svého konání a snaží se tak uplatnit i „turistický“ aspekt, zájem o kongresy CHISA, pořádané již přes 30 let na stejném místě, rozhodně neklesá. Kromě tradice, dobře strukturovaného programu a kvalitní organizace je zde bezesporu významná „přidaná hodnota“ pražského *genia loci*.

Akronym CHISA je zkratkou českého názvu chemické inženýrství, strojírenství a automatizace a národní konference se pod touto hlavičkou konají pravidelně v mezidobí mezi kongresy. Jen pro doplnění – první národní konference CHISA proběhla v r. 1956, tedy přesně před půl stoletím. Kongresy CHISA organizuje Česká společnost chemického inženýrství v úzké spolupráci s Ústavem chemických procesů AV ČR a s podporou Inženýrské akademie ČR a VŠCHT Praha a pravidelně se ho účastní zhruba tisícovka vědců z celého světa. Na letošním kongresu, nad nímž převzal záštitu předseda AV ČR prof. Václav Pačes, byli zastoupeni vědci z 64 zemí pěti kontinentů.

Slavnostní zahájení kongresu se konalo ve Dvořákově síni Rudolfiny za účasti představitelů Evropské federace chemického inženýrství, Americké společnosti chemických inženýrů, Britské společnosti chemických inženýrů a řady dalších významných domácích i zahraničních hostů. Zúčastněné pozdravili prof. Jiří Drahoš jako prezident Evropské federace chemického inženýrství, prof. Václav Pačes, předseda AV ČR a prof. Petr Zuna, prezident IA ČR. Z rukou předsedy České společnosti chemického inženýrství prof. Jiřího Drahoše převzali čestná členství ve společnosti prof. Gerhard Kreysa z Německa a dr. Trevor Evans z Velké Británie. Součástí společenského programu kongresu byl i tradiční koncert ve Smetanově síni, tento-

krát s Virtuosi di Praga, doplněnými Pražskými žesti a sólisty pražských operních scén. Zaplněná Smetanova síň nadšeně aplaudovala skladbám P. J. Vejvanovského, A. Vivaldiho a W. A. Mozarta.

Odborná část programu probíhala na stavební fakultě ČVUT v jedenácti paralelních sekcích (podrobnosti na www.chisa.cz/2006): během čtyř dnů odezněly dvě kongresové plenární, čtyři specializované plenární a 63 zvaných přehledných přednášek. Účastníci kongresu dále prezentovali přes 1300 standardních příspěvků ve formě přednášek i vývěsek. Za zmínku určitě stojí obě kongresové plenární přednášky: přístup významné nadnárodní firmy k využívání energetických zdrojů v blízké budoucnosti prezentoval dr. Greg Lewin (prezident firmy Shell Global Solutions Int.) v tématu *Possibilities into reality to create greener energy future*; prof. Klavs Jensen z MIT pak hovořil v přednášce nazvané *Chemical and biological microsystems: a revolution in discovery and development* o neuvěřitelně rychle se rozvíjejícím využití chemických mikroreaktorů. V souvislosti s mikroreaktory se nelze nepozastavit nad tím, že pokud se naše média vůbec věnují oblasti vědy a výzkumu, skloňují do omrzení slova jako nanotechnologie, biotechnologie či genetika, a zcela ignorují jiné, neméně atraktivní oblasti. Právě mikroreaktory lze označit za technologickou revoluci, která v současné době hýbe chemicko-inženýrským výzkumem na celém světě. Možnosti využití mikroreaktorů jsou zcela mimořádné a zahrnují i oblasti výše zmíněných „hitů“ současné vědy: od bezpečné syntézy celé řady látek v reaktorech nepřesahujících velikost hokejového puku, přes přípravu přesně definovaných nanočástic nebo využití jako miniaturního zdroje energie, až k nasazení různých typů mikrobioreaktorů, umožňujících pracovat velmi efektivně s velmi malým množstvím buněk či genů (v objemu nanolitru), v uspořádání typu „lab-on-the-chip“, tedy s kompletním reaktorem na ploše velikosti počítačového čipu.

V rámci kongresu proběhla rovněž celá řada specializovaných sympozií věnovaných například průmyslovým aplikacím mikrotechnologií, otázkám inženýrství životního prostředí, problémům bezpečnosti v chemickém průmyslu nebo specifickým rysům inženýrského vzdělávání. Kongres se samozřejmě věnoval i tradičním chemicko-inženýrským tématům, jako jsou reakční inženýrství, katalýza nebo separační procesy. Součástí kongresu byla 9. mezinárodní konference PRES 2006, akcentující problematiku integrace, modelování a optimalizace procesů pro úsporu energií a snížení znečištění životního prostředí. Z odborného programu kongresu byla zřejmá snaha chemického a procesního inženýrství zahrnout do návrhu procesů všechny klíčové aspekty: vysoce účinné, bezpečné a životní prostředí nepoškozující technologie; produkty šité na míru a umožňující efektivní využití vstupních surovin; minimální rozměry aparátů s maximálním stupněm intenzifikace výroby a recyklace použitých materiálů; využití víceúčelových aparátů při výrazném snížení jejich finanční náročnosti. Kongres také jednoznačně ukázal, že právě chemické a procesní inženýrství je hlavní hybnou silou pro udržitelný rozvoj chemického průmyslu a pro

celou řadu inovací nezbytných k řešení potřeb společnosti v nejrůznějších oblastech, jako jsou např. energetika, nové materiály, ochrana životního prostředí, kvalita života apod.

Odborný program kongresu doprovázely prezentace českých i zahraničních komerčních firem. V rámci kongresu proběhla též zasedání vrcholových orgánů Evropské federace chemického inženýrství a jejich pracovních skupin.

Poděkování za finanční podporu kongresu patří firmám Unipetrol, DEZA, Precheza, Česká rafinářská, Pražská plynárenská, BorsodChem MCHZ, Hexion, CS Cabot, Chemopetrol, Zentiva a Mitsubishi Chemical.

*Jiří Drahoš
předseda kongresu CHISA 2006
ÚCHP AV ČR*

29. evropské peptidové sympozium

Ve druhém zářijovém týdnu se v Gdaňsku uskutečnilo 29. EPS. Účast byla neobvykle malá, přijelo pouze cca 700 aktivních účastníků. Z mimoevropských zemí byly zastoupeny např. USA, Kanada, Brazílie, Austrálie, Nový Zéland, Čína, Japonsko, Jižní Korea, Indie, Írán a Egypt. Jelikož organizací byla pověřena firma Kenes, člověk si během symposia připadal, jako kdyby byl v Pentagonu. Firma použila bezpečnostní agenturu a člověk se bez visačky či příslušné vstupenky nikam nedostal. Dokonce odmítli vstup rektoru místní univerzity (spolu-organizátoru symposia), když si zapomněl příslušný lístek. Další z věcí, která by se dala organizátorům vytknout, byla určitá míra chaosu v realizaci přednášek. Několikrát se odehrála situace, kdy musel přednášející požádat, aby mu spustili jeho prezentaci. Nejhumorněji to zvládl D. Andreu z Barcelony, který prohlásil „O MUC1 peptidech bych mohl taky dát přednášku, ale raději bych mluvil o vakcíně proti slintavce a kulhavce“.

V další části tohoto článku se budu věnovat odbornému programu symposia a novinkám, které byly prezentovány. Symposium bylo rozděleno do 22 tématických skupin, zahrnujících syntézu, strukturální analýzu a modelování peptidů a jejich aplikace v biochemii, biologii, medicíně a nanotechnologiích.

Nejprve se zaměříme na syntézu peptidů a proteinů. V této oblasti nejefektivnější příspěvek přednesl F. Bordusa z Halle an der Saale. Zabývají se využitím proteas k chemické modifikaci proteinů na *N*- i *C*-konci. Metoda je založena na kondenzaci značeného prekurzoru aminokyseliny nebo peptidu s proteinem v místě specifickém pro enzym. Aby se předešlo nechtěné hydrolyze proteinu určeného ke kondenzaci, připraví se geneticky modifikované proteasy, které jsou specifické pro delší úsek peptidové sekvence. Např. trypsin s mutacemi K60E, N143H, E151H, D189K byl použit k zavedení *N*-dansyl glycinu na *N*-konec H-Met-His-Parvulinu 10, který tento protein fluorescenčně označil.

Skupina od Y. Kisa z Kjóta předvedla sérii příspěvků

týkajících se syntézy isomerních depsi-peptidů. Využívá se zde přerušení peptidového řetězce pomocí tvorby esteru v postranním řetězci aminokyseliny, jako jsou Ser a Thr. Vhodnou volbou pH dojde k přesmyku na odpovídající peptid. Strategie se využívá k syntéze tzv. obtížných sekvencí. Y. Sohma syntetizoval všechny možné chráněné depsi-di-peptidy odvozené od Thr, které mohou být použity jako stavební bloky kompatibilní s automatizovanou syntézou peptidů na pevné fázi. Dále ukázal, že použití takto upraveného Thr či Ser na *C*-konci peptidu umožní segmentovou kondenzaci bez racemizace.

P. Wadhvani z Karlsruhe použil značení peptidů ^{19}F , aby mohly být studovány pomocí ^{19}F -NMR. Ukázal, že interakce přes prostor jde studovat až do vzdálenosti 14 Å, na rozdíl od běžně dostupných 5 Å. Jediná podmínka pro použití této metody je nahradit TFA při HPLC čištění za HCl.

Bezesporu ovlivnění interakce protein-protein pomocí nízkomolekulárních ligandů povede jednou k objevení nových léčiv. Z této oblasti jsem vybral přednášku J. Eichlerové z Braunschweigu. Zaměřením se na Mena-EVH1 doménu pomocí peptidů bohatých na prolin se jim povedlo interakci s povrchovým proteinem ActA od *Listeria monocytogenes* zabránit mikroorganismu použití aktinu od hostitelského organismu a tím omezit jeho šíření usnadňované buňečným aktinem. Podobný úspěch měli i s interakcí CD4bs s HIV-1 gp120. Jejich prolinový konstrukt dokáže omezit vniknutí HIV-1 viru do buňky.

A. Perczel z Budapešti poukázal na marnou lidskou snahu napodobit přirozené inhibitory proteas. Silné přírodní inhibitory mají IC_{50} v intervalu 0,1–1 pM, zatímco umělé jsou jen občas sub-nanomolární. Přírodní inhibitory vykazují tuto vlastnost: jedna molekula inhibitoru (např. BPTI vs. Trypsin) deaktivuje jednu molekulu enzymu. Pomocí teoretické studie ukázal, že je důležité, aby „klíč“ nebyl rigidní, tj., aby se přizpůsobil vazebnému místu. Toto dokonalé přizpůsobení se zámku-klíči zmiňoval i E. Benedetti z Neapole, jelikož objevil filosofickou studii publikovanou v roce 55 př. nl., která o tomto tématu pojednává.

Poměrně významné bylo zjištění prezentované na posteru B. Penkeho ze Szegedu. Ukázal inhibitory toxicity A β 1-42 při Alzheimerově chorobě. Tyto inhibitory zabráňují A β 1-42, aby byl neurotoxický, ale neovlivňují schopnost tvořit amyloidní plaky. Tj. CNS prorůstá amyloidními plaky, aniž by se ztrácely kognitivní funkce.

Setkali jsme se s pojmy „Crypteins“ a „Cryptomics“. Krypteiny jsou proteiny nebo peptidy, které vznikají řízenou proteolýzou (podchlazením) biologicky aktivních proteinů či peptidů. Tedy jsou produkty částečné hydrolyzy. V přírodě se pozvolné hydrolyzy využívá k řízení procesů, uvedu zde příklad prezentovaný F. Nybergem z Uppsaly. Proteolýzou nociceptinu vzniká nociceptin13-17, který je antagonist na nociceptinovém receptoru, a nociceptin1-7, který moduluje aktivitu příslušného receptoru. A. I. Smith z Melbourne ukázal, že tato strategie pozvolné hydrolyzy může být vhodná pro nalezení látek s novou biologickou aktivitou. Kryptomika by měla být věda, která

zkoumá takto objevené látky.

Ze sekce nanotechnologie byla zajímavá přednáška S. Zhanga z Cambridge, Massachusetts. Na základě molekulárního designu navrhli peptidový cement, tedy peptidy, které samoorganizací (hydrofobní interakce a interakce iontového páru) vytvoří biokompatibilní výplňový materiál. Tento materiál není imunogenní a jde využít pro hojení ran bez jizev. Velké uplatnění je předpokládáno k regeneraci nervových spojení po nehodách. Dále prezentoval peptidové detergenty např. H-(Val)₆-Asp-OH nebo kationtový Lys analog. Peptidové detergenty jsou výhodné pro krystalizaci membránových proteinů, které jinak jsou obtížně krystalovatelné.

Závěrem musím říci, že ačkoliv konferenci provázeli některé organizační nedostatky, jako celek byla velmi podnětná. Zároveň člověk mohl pozorovat život v historickém centru Gdaňsku, které bylo na druhé straně řeky Motławy, kam bylo spojení zajišťováno pendlující lodí.

Jaroslav Šebestík

Zpráva z konference – Eliminační metody

Dne 10. října 2006 v deset hodin dopoledne v prostorách auly na Biofyzikálním ústavu Akademie věd České republiky byla zahájena jednodenní konference s názvem Eliminační metody. Organizačně byla připravena paní Doc. RNDr. Libuší Trnkovou, CSc. z Katedry teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity. Datum a hodina začátku konference nebyly zvoleny náhodou, protože měly velmi vhodně korespondovat s důvodem, proč byla tato konference uspořádána a to bylo a je desáté výročí od uveřejnění Eliminační voltametrie (EVLS – Elimination Voltammetry with Linear Scan)¹. Navíc je nezbytné připomenout, že v této době také uplynulo dvacet let od popsání eliminační polarografie (EP – Elimination Polarography)². Oba postupy navrhl po teoretické stránce pan prof. RNDr. Oldřich Dračka, DrSc.

Zatímco po experimentální linii se eliminačními metodám velmi intenzivně a s velkým entuziasmem věnuje právě doc. Trnková^{3–6}. Program semináře byl rozčleněn do tří přednáškových bloků. První blok přednášek byl věnován teoretickým základům eliminačních metod, jejich dalšímu rozvoji a budoucnosti, přičemž celou konferenci zahájil Prof. Dračka popsáním samotného vzniku těchto nových elektrochemických metod.

Druhý blok setkání se věnoval praktickým aplikacím eliminačních metod pro studium biologicky významných látek. Pomocí eliminačních metod jsou v dnešní době studovány oligonukleotidy, DNA, malé peptidy i velké proteiny. Třetí blok přednášek byl zaměřen na využití eliminačních metod pro studium procesů probíhajících na povrchu pracovních elektrod při detekci jak anorganických, tak organických látek.

Seminář přinesl celou řadu nových a zajímavých poznatků a ukázal, že eliminační metody mohou přinášet zajímavá experimentální data jak pro základní, tak pro aplikovaný výzkum.

Pro zájemce je k dispozici program setkání na http://cheminfo.chemi.muni.cz/ktfch/EVLS%20I_06/EVLSI_06.htm a dále byl vydán sborník rozšířených abstraktů⁷.

LITERATURA

1. Dračka O.: *J. Electroanal. Chem.* 402, 19 (1996).
2. Dračka O.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 51, 288 (1986).
3. Trnkova L., et al.: *Electroanalysis* 12, 905 (2000).
4. Trnkova L., Dračka O.: *J. Electroanal. Chem.* 413, 123 (1996).
5. Trnkova L., Dračka O.: *J. Electroanal. Chem.* 348, 265 (1993).
6. Trnkova L.: *Chem. Listy* 95, 518 (2001).
7. Sborník příspěvků. *Eliminační metody I.*, 58 (2006).

René Kizek

Zprávy

Long- Range Research Initiative - startuje 3. fáze

Jak jsme již naše čtenáře informovali v únorovém čísle (*Chem. Listy* 100, 148 (2006).), Cefic (Evropská rada chemického průmyslu) pokračuje ve své záslužné iniciativě zaměřené na identifikaci a vyplnění mezer v našich znalostech týkajících se možných rizik souvisejících s působením chemických látek na živé organismy a na zlepšení metod umožňujících vyhodnocení rizik souvisejících s expozicí chemickým látkám. Dlouhodobý projekt nazvaný Long-Range Research Initiative (LRI) si klade za cíl poskytnout solidní vědecké podklady umožňující jak chemickému průmyslu, tak i příslušným regulačním auto-

ritám reagovat na oprávněné obavy a dotazy široké veřejnosti týkající se:

- účinnosti a spolehlivosti chemických testovacích metod,
- vlivu environmentálních faktorů na lidskou populaci jako celek i na zvláště citlivé složky populace (děti),
- vlivu rozpojovačů hormonů (endokrinních disruptorů) na živé organismy,
- alternativních metod testování za účelem odhadu rizik chemických látek eliminujících pokusy na zvířatech.

Tento projekt odráží globální snahu chemického průmyslu posílovat interakci vědy s širokou veřejností a vylepšit neprávem zdiskreditovanou představu chemie, která je v očích široké veřejnosti považována za škůdce životní

ho prostředí a disciplinu ohrožující lidské zdraví. Snahu o účinnou a kvalitní interakci mezi vědou, průmyslem, veřejností a politikou, která může výrazně prospět při optimalizaci podmínek pro trvale udržitelný rozvoj v oblasti chemie a chemického průmyslu.

Dosavadní výzkumný program byl zaměřen na tři následující oblasti:

- zhodnocení vlivu chemických látek v pracovním a životním prostředí na lidské zdraví a kvalitu každodenního života,
- snaha o lepší pochopení mechanismů, kterými mohou chemické látky negativně působit na životní prostředí,
- pochopení mechanismů působení tzv. rozpojovačů hormonů a zavedení celosvětově platných testovacích metod umožňující odhalit látky s těmito účinky.

LRI je tedy jakýmsi výrazem závazku chemického průmyslu k odpovědné péči (Responsible Care) o životní prostředí a lidské zdraví, dobrovolnou iniciativou zaměřenou na zlepšování životního prostředí, bezpečnosti, kvality lidského života a zdraví každého jednotlivce i společnosti jako celku.

Ve dnech 15. a 16. listopadu 2007 se v Bruselu konal již 8. LRI Members Workshop, který odstartoval 3. fázi projektu LRI na příští pětileté období. Byly zde definovány konkrétní priority na následující období, přičemž v roce 2007 bude pozornost koncentrována do následujících 3 oblastí:

- biomonitorování,
- endokrinní disruptory,
- PBT (Persistent, Bioaccumulation and Toxicity).

Celkově je třetí fáze projektu LRI diktována v zásadě prioritami chemického průmyslu souvisejícími s nástupem REACH (Registration, Evaluation and Authorization of Chemicals), který bude mít pochopitelný dopad i na české podniky. Na řízení programu se podílí 11 zástupců nadnárodních společností v tzv. R&S Board, 12 zástupců nadnárodních společností a 2 členové odborné společnosti ECEG v tzv. LRI Programme Governance a 8 členů nadnárodních společností, 2 členové z národních chemických federací a 1 zástupce z Cefic v tzv. Innovation Program Governance. Bez výjimky jde tedy o zástupce starých členských států Evropské unie.

Řada z výše uvedených námětů by mohla zajímat i česká výzkumná pracoviště. Je trochu škoda, že z 3,5 mil EUR věnovaných na tento projekt nenašla ani minimální částka cestu do naší republiky. Přitom se domníváme, že částka 170 000 EUR, za niž v rámci tohoto projektu vznikla jedna odborná publikace, je řádově vyšší nežli částka, za kterou produkuje jednu odbornou publikaci naše průměrné vědecko-výzkumné pracoviště.

Možná, že malé zamyšlení a pohled na stránky www.cefic-lri.org by tuto situaci mohlo změnit jak z hlediska zastoupení České republiky v řídicích orgánech, tak i z hlediska případného čerpání poměrně zajímavých finančních částek.

Autoři děkují Svazu chemického průmyslu ČR a Čes-

ké společnosti chemické, jejichž aktivity v této oblasti a vzájemná příkladná spolupráce jim umožnily účast na této bezesporu zajímavé akci.

*Jiří Barek a Vladimír Janeček
Barek@natur.cuni.cz, vladimir.janecek@schp.cz*

Kurs o vysokoúčinných analytických separacích biologicky aktivních látek proběhl ve dnech 4. až 9. září 2006, v rámci činnosti Pražského analytického centra inovací (PACI)

Nejprve pár vět o tom, co vlastně mazlivá zkratka PACI označuje. Jde o projekt, který je součástí grantového schématu č. 4.2.01, nazvaného „Spolupráce výzkumných a vývojových pracovišť s podnikatelskou sférou, podpora inovací“ a financovaného Evropským sociálním fondem spolu se Státním rozpočtem České republiky. Z obou názvů je zřejmé, že projekt má přispívat k řešení palčivého problému přenosu výsledků základního výzkumu do co nejširší praxe a podporovat systematické a racionální vztahy mezi akademickou a podnikatelskou sférou. Je zaměřen na analytickou chemii, jeho nositelem je Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, jejímiž partnery dále jsou Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Spektroskopická společnost Jana Marka Marci, Česká společnost chemická, EURACHEM-ČR, pražské pracoviště Ústavu analytické chemie AV ČR a Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR. Na činnosti PACI se podílí i společnost ISIS Ltd., která patří britské univerzitě v Oxfordu, zajišťuje její účinné spojení s praxí a je tedy jakýmsi starším a daleko zkušenějším sourozencem PACI.

PACI (a periodicky dojíždějící ISIS) organizují kurzy, přednášky a diskusní setkání, jejichž témata zahrnují seznamování se současným stavem důležitých oborů a směrů analytické chemie, otázky validace a akreditace analytických postupů, normotvorné činnosti, řízení výzkumných jednotek a cest k praktickému uplatnění výsledků výzkumu a inovací a v neposlední řadě i společenská pravidla komunikace mezi výzkumnou a podnikatelskou oblastí. Podrobné informace o PACI a jeho aktivitách lze nalézt na adrese: <http://www.gacr.cz/PACI>.

Pětidenní kurs o separacích biologicky aktivních látek je myslím dobrým příkladem aktivit PACI. Základním motivem pro organizaci takového kursu je současný nesmírný rozvoj biologických a lékařských věd, který zásadním způsobem ovlivňuje život lidstva. Nezastupitelnou a velmi důležitou roli ve výzkumu i každodenní praxi biologie a medicíny hraje analytická chemie, na kterou jsou kladeny neobyčejně vysoké nároky. Tyto nároky naopak stimulují překotný metodický vývoj analytické chemie. Cílem kursu tedy bylo podat podstatné informace o současných přístupech k analýze typických biologicky významných systémů. Pozornost byla věnována jednak současným trendům v chromatografických a elektromigračních technikách a jejich kombinacích s hmotnostně spekt-

rometrickou detekcí, dále pak afinitním technikám a chirálním separacím. Byly shrnuty podstatné informace o separacích nejdůležitějších skupin biologicky významných látek, od aminokyselin, přes peptidy, až po proteiny a glykoproteiny. Nebyly zanedbány ani některé důležité operace s biologickými vzorky, bez kterých separace a následné analýzy nelze spolehlivě provést.

Na kursu přednášeli přední odborníci v různých odvětvích tohoto rozsáhlého pole, z kateder analytické chemie a biochemie Přírodovědecké fakulty UK, z Biologického centra AV ČR v Českých Budějovicích, z 1. lékařské fakulty UK, z Ústavu analytické chemie AV ČR v Brně i ze zámoří, z Indiana State University v Bloomingtonu, USA. V závěru kursu byly zařazeny i praktické demonstrace dvou velmi moderních technik, HPLC-MS na čipu a MALDI-MS. Přednášející vytvořili rovněž skripta, která byla účastníkům k dispozici. V době, kdy tento sloupek píše, připravujeme zařazení podkladů přednášek na www stránky PACI.

V průběhu kursu mě potěšilo několik věcí. Byla to velká ochota a aktivita všech, kdo byli osloveni, aby přednesli přednášku. Byla to vysoká úroveň všech přednášek. Byl to značný zájem odborné veřejnosti o účast na kursu a bohaté diskuse účastníků při i po přednáškách. Myslím, že kurs byl užitečný a inspirativní pro obě strany – přednášející i posluchače.

Karel Štulík



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a Státním rozpočtem České republiky.

Třináctý nositel Ceny Alfreda Badera za organickou chemii, rok 2006

Dvanáctým nositelem Ceny Alfreda Badera za organickou chemii pro české chemiky do 35 let se stal Doc.RNDr. Petr Štěpnička PhD. (34 let) z Přírodovědecké fakulty na Univerzitě Karlově v Praze. Předložil soubor prací s názvem „Chemie (difenylfosfino)ferrocenkarboxylových kyselin – syntéza, koordinační chemie a aplikace“. Slavnostní předání Ceny* se tradičně uskutečnilo na 41. konferenci "Pokroky v organické, bioorganické a farmaceutické chemii – Liblice 2006" konané v Nymburku a zde, jak se již stalo tradicí, nový laureát přednesl plenární přednášku na téma oceněného souboru prací.

Nový nositel Ceny se narodil v Liberci v roce 1972. Vysokoškolské studium absolvoval na Katedře anorganické

ché chemie Přírodovědecké fakulty UK (1993 Bc.), kde získal diplom Magistra chemie v r. 1995. Na stejném pracovišti pokračoval v doktorském studiu a v r.1998 obhájil doktorskou dizertační práci. Již během studia byl na katedře zaměstnán jako asistent (1995–1998) a po získání vědecké hodnosti jako odborný asistent a v r. 2005 se stal docentem. V r. 1997 byl na stáži na Univerzitě v Rennes (Francie) a o rok později absolvoval roční stáž na Univerzitě v Sapporu (Japonsko). Je řešitelem a spoluřešitelem řady grantových projektů. Zabývá se studiem nových ferrocenových ligandů, syntézou polárních organokovových sloučenin, které jsou vhodné pro přípravu uspořádaných pevných materiálů, a dále reakcemi a syntetickým využitím ferrocenylalkynů včetně aplikací v bioorganometalické chemii. Dosažené výsledky byly dosud publikovány v úctyhodných 82 původních sděleních v recenzovaných odborných časopisech. Nový nositel Ceny získal již několik ocenění za své výsledky – Cenu rektora Univerzity Karlovy (1995), Cenu za chemii (1. místo, 1996) a Cenu české společnosti chemické za diplomovou práci (1996).

Srdečně blahopřejeme k získání prestižní Ceny Alfreda Badera a přejeme hodně dalších odborných úspěchů.

Dosavadní nositelé Ceny Alfreda Badera 1:

1) RNDr. Ivo Starý CSc. (1994), Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Praha; 2) RNDr. Martin Smrčina CSc. (1995), Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Praha; 3) Dr. Ing. Vladimír Havlíček (1996), Mikrobiologický ústav AVČR, Praha; 4) Ing. Pavel Lhoták CSc. (1997) Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Praha; 5) Ing. Michal Hoskovec CSc. (1998), Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha; 6) Ing. Michal Hocek CSc. (1999), Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha; 7) Ing. Vladimír Círka PhD. (2000), Ústav chemických procesů AV ČR, Praha; 8) Doc. RNDr. Milan Pour PhD. (2001), Farmaceutická fakulta UK, Hradec Králové; 9) Mgr. Štěpán Vyskočil PhD. (2002), Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Praha; 10) Mgr. Tomáš Kraus PhD. (2003), Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha; 11) Ing. Dana Hocková CSc. (2004), Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha; 12) Ing. Radek Cibulka PhD. (2005), Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Praha.

Přihlášky do soutěže o Cenu Alfreda Badera za organickou chemii v r. 2007 Cena je dotována částkou 3300 USD

V roce 2007 bude Česká společnost chemická pořádat opět soutěže o dvě Ceny Alfreda Badera. „Starší“ Cena je

* Hodnotící komise: Prof. P. Drašar (tajemník), Prof. D. Dvořák, Prof. A. Klásek, Prof. M. Kotora, Prof. V. Macháček, Prof. M. Potáček, Prof. O. Paleta (předseda), Dr. I. Starý, Prof. T. Trnka, Prof. K. Waissner, Dr. J. Závada.

za organickou chemii, „mladší“ Cena je od r. 2002 udělována za bioorganickou a bioorganickou chemii. Nemusi být pochyb o tom, že oblasti působnosti obou Cen se dosti překrývají. Markantním důkazem překryvu Cen může být skutečnost z minulých ročníků soutěže, že soubor prací, který neuspěl v jedné soutěži, byl přihlášen do soutěže o druhou Cenu – a zde uspěl. Nadále však platí omezení, že je možno získat jen jednu z Cen Alfreda Badera pro české chemiky, přitom obě Ceny jsou rovnocenné.

Uzávěrka přihlášek do konkurzu o „Cenu za organickou chemii v roce 2007“ byla stanovena na 15. červen 2007 (případně datum poštovního razítka). Podmínky a náležitosti přihlášky zůstávají v podstatě stejné jako v minulých letech: Cena se uděluje za práce v oblasti organické chemie uchazečům české státní příslušnosti, kteří nepřekročí věk 35 let v den uzavěrky přihlášek a nemají hlavní pracovní poměr v zahraničí (postdoktorská stáž se za takový pracovní poměr nepovažuje). Soubory přihlášených prací mohou rovněž zahrnovat studie mechanismů. Na druhé straně do působnosti Ceny nepřísluší práce z analytické oblasti (včetně strukturní analýzy) a výpočetní chemie. Uchazeči o Cenu se zpravidla přihlašují sami na sekretariátu České společnosti chemické, návrh však mohou podat také kolegové, instituce a rovněž vědecké rady a senáty. Cena je udělována nejlepšímu souboru prací bez ohledu na to, kolikrát se autor o ni ucházel. *Od r. 2005 je Cena je dotována částkou 3300 USD.* Tato úprava odpovídá původní dotaci a týká se obou Cen.

Hlavní částí přihlášky jsou separáty publikovaných

prací a k nim zpracovaný *souhrn vlastních výsledků* s příslušným komentářem v rozsahu 3–6 běžných strojopisných stran. V seznamu publikací se hvězdičkou označí autor, který práci podal do redakce a vyřizoval komunikaci s redakcí. Souhrn obsahuje vhodná schémata a struktury ilustrující výsledky uchazeče, dále jsou v souhrnu uvedeny citace jen na příslušné práce, které jsou předmětem soutěže. Řada publikací vzniká týmovou činností a z toho důvodu je potřeba uvést v seznamu publikací, jak se uchazeč na publikaci a jejím zveřejnění podílel (např. šlo (zčásti) o výsledky diplomové práce, výsledky doktorské práce, (zčásti) řešení grantu získaného uchazečem, samostatně řešenou část projektu, vlastní projekt, výsledky diplomanda nebo doktoranda – které uchazeč školil apod.). Nedoporučuje se hodnotit svůj podíl procentuálně, protože kupř. novou myšlenku a zkušenosti jiné osoby, které úspěšnou práci umožnily, lze těžko procentuálně srovnávat s provedením práce. Příložený životopis by měl zachytit odborný vývoj, např. téma diplomové a doktorské (kandidátské disertace) se jménem školitele, získaná ocenění, stáže a jejich tematické zaměření, získané granty apod. Hodnotící komise posuzuje soubory prací nezávisle na doporučeních školitelů, vedoucích apod., takže přihláška je plně platná a plnohodnotná i bez těchto doporučení.

Na závěr zdůraznění – **uzávěrka je 15. června 2007**, což případně může být datum poštovního razítka.

Oldřich Paleta,
předseda Komise pro Cenu Alfreda Badera I

Noví členové ČSCH

Bachmanová Markéta, studující VŠCHT Praha
Bambuch Vítězslav, Mgr., ÚOCHB Praha
Bencová Veronika, studující VŠCHT Praha
Beňo Jaroslav, Ing., VŠB Ostrava
Beňovský Petr, RNDr., PhD., Syntho Brno
Bešková Barbora, studující VŠCHT Praha
Bílá Alexandra, studující VŠCHT Praha
Bolyó Juraj, Ing., ÚCHP Praha
Buňka František, Ing., Phd., UTB Zlín
Čechlovská Hana, Ing., VUT Brno
Černá Martina, Mgr., PedF UK Praha
Černý Aleš, MUDr., Vojenská nem. Brno
Čuříková Martina, Mgr., LF UP Olomouc
Dejmková Hana, Mgr., PFF UK Praha
Domlátil Jiří, Ing., VŠCHT Praha
Dornerová Daniela, Ing., Sigma-Aldrich Praha
Dvořáková Alena, Ing., Arcibiskupské gymnázium Kroměříž
Geržová Hana, studující UTB Zlín
Gomba Gordon Karikoga, studující VŠCHT Praha
Hasáková Ivana, Ing., studující UTB Zlín
Heinrich Jan, Mgr., Walmart, a.s. Olomouc
Henke Adam, studující VŠCHT Praha
Henková Pavla, Mgr., LF UP Olomouc
Hermannová Soňa, PhD., VUT Brno
Híml Michal, Ing., VŠCHT Praha
Hlaváčková Martina, Ing., VŠCHT Praha

Hlinka Jiří, studující VŠCHT Praha
Hovorková Aneta, Ing., Univerzita Pardubice
Hývl Jakub, studující Univerzita Pardubice
Chomoucká Jana, Ing., VUT Brno
Chovancová Jana, Ing., VUT Brno
Jančová Petra, Mgr., LF UP Olomouc
Janků Slávka, RNDr., PhD., PFF MU Brno
Janiš Rahula, Ing., CSc., UTB Zlín
Jelínková Romana, Ing., ÚOPZHN Vyškov
Jeřábek Tomáš, Bc., VŠCHT Praha
Jiráček Josef, Ing., Univerzita Pardubice
Jiráček Aleš, RNDr., OSVČ Praha
Jiráček Michael, Gymnázium Český Brod
Kandelová Martina, Ing., Univerzita Pardubice
Karlova Tereza, Ing., VŠCHT Praha
Kimmel Roman, Ing., UTB Zlín
Kotková Kateřina, Ing., Univerzita Pardubice
Kotlín Roman, Ing., ÚHKT Praha
Kovář Michal, Ing., UTB Zlín
Krejčí Jiří, Ing., CSc., UTB Zlín
Krejčík Lukáš, Bc., VŠCHT Praha
Kubalová Michala, studující VŠCHT Praha
Kubelka Tomáš, studující PFF UK Praha
Kundrát Ondřej, Ing., VŠCHT Praha
Lacina Ondřej, Ing., VŠCHT Praha
Lukáč Jozef, Ing., ÚACH Řež u Prahy

Lukszová Veronika, studující VŠCHT Praha
 Mačáková Alena, studující UTB Zlín
 Marková Lenka, studující VŠCHT Praha
 Mokrejš Pavel, Ing., PhD., UTB Zlín
 Možíšková Petra, Ing., VUT Brno
 Němeček Josef, CPN s.r.o. Dolní Dobrouč
 Nováková Zdena, Ing., VŠCHT Praha
 Ondrášová Monika, Mgr., PhD., UTB Zlín
 Paldusová Barbora, studující VŠCHT Praha
 Pluskal Martin, studující VŠCHT Praha
 Pojarová Michaela, Ing., VŠCHT Praha
 Poláková Lenka, Ing., VŠCHT Praha
 Pospíšil Jaroslav, Ing., Univerzita Pardubice
 Proklesková Eva, Ing., Univerzita Pardubice
 Raindlová Veronika, studující VŠCHT Praha
 Robstecková Michaela, studující VŠCHT Praha

Spáčilová Pavla, Bc., PřF UK Praha
 Stará Danuše, RNDr., CSc., UTB Zlín
 Storch Jan, Ing., VŠCHT Praha
 Sukop Svatopluk, studující UTB Zlín
 Šedivec Vratislav, Mgr., PedF ZČU Plzeň
 Štajgerová Lenka, studující LF UP Olomouc
 Štěrbová Lucie, Ing., VŠCHT Praha
 Švarcová Irena, Ing., LF UP Olomouc
 Vagenknecht Ondřej, Bc., VŠCHT Praha
 Valoušková Eva, Ing., LF UP Olomouc
 Vitásková Lucie, Ing., Univerzita Pardubice
 Vrublová Eva, Mgr., LF UP Olomouc
 Wolfová Lucie, Ing., VUT Brno
 Zelenka Karel, Mgr., PřF UK Praha
 Žabčík Marek, Ing., Univerzita Pardubice
 Žurek Jiří, studující VŠCHT Praha

Chemik na cestách

Memorable experience

V přírodě se dějí věci s určitou pravděpodobností. Tak třeba elektron. Elektron buď „vidíme“ běžet a nevíme, kudy nám vlastně přesně proběhl, anebo si „změříme“, kde je, ale zase nevíme, jak rychle nám tudy proběhl. Marná snaha, ať se snažíme, jak chceme, oboje zaráz to prostě nejde. To samé je s chemií – člověk jí propadne a neví, kdy přestat a když (náhodou!) přestane, už už má chuť jí znovu propadnout. Osobně si myslím, že jistá aviváž tohoto principu neurčitosti působí ve směru vyšší pravděpodobnosti propadnutí, než-li přestání. Pravdou samozřejmě také je, že s jistotou danou pravděpodobností mohou tvrdit, že pokud se nějakou náhodou člověk dostane do kolotoče Chemické olympiády a podaří se mu dosáhnout pomyslného Olympu účasti na MCHO, určitě a dozajista si s vysokou pravděpodobností odnese do života takovou „memorable experience“, na kterou jen tak nezapomene...

Letošní „mezinárodka“ se konala v Jižní Korei, což už samo o sobě v každém vyvolá emotivní pocit, alespoň neuvěřitelného dojmu z poznání dalece východní kultury a jemné exotiky. Spojení tohoto pocitu s hřejivým pocitem být členem reprezentačního týmu České republiky ve mne vzbuzuje dodnes opravdu nezapomenutelné dojmy a vzpomínky. Ale hezky po pořádku. Když se to tak vezme, chemie je opravdu obor snad jeden z nejolympiádníctějších, jen třeba loňský školní rok byl naprosto dokonalým a vyčerpávajícím maratónem: pozvolný start ve školním kole někdy ke konci podzimu. Za startem hned rozehřívací sprintík v krajském kole soutěže. Člověk se ani nenadal a už se blížil k půli trati na celostátně v Praze a najednou zlom! 1. teoretické soustředění jako běh do nekonečně dlouhého kopce, chvilku volný poklus směrem k další náročné části trati – praktickému soustředění a konečně delší pauza na rovině, možná snad se zastávkou u maturity. No a každý, kdo někdy doběhl závod, ví, že finiš a pohled na cílovou pásku je ta nejhromnější část soutěže –



nejinak je to i s Mezinárodní chemickou olympiádou. Zajímavé však bylo, že i když se jednalo o chemical competition – já, a řekl bych stejně tak i ostatní, jsme to prožívali naprosto odlišně. Nikdo z nás nepadl chemickým vyčerpáním, zato si všichni závěr celoročního soutěžení co nejvíce užili. Teoretický test a praktické úkoly, které trvaly po pěti hodinách, nebyly nakonec vlastně ani tím hlavním, hlavní bylo doběhnout až na vrchol a pořádně si vychutnat tu „memorable experience“.

Díky neuvěřitelné pili, snaze a ochotě organizátorů, kteří pro nás připravili opravdu nabitý program, jsme se ani na chvíli nenudili. Bylo to nějak takhle: přilet, příjezd, příchod či jak jinak nazvat naši cestu přes půl zeměkoule do (místo určení? jaksetopíše?) byl vskutku náramný – díky časovému posunu jsme měli možnost pobýt v Koreji několik dní navíc, abychom se řádně aklimatizovali a mohli se předvést na plný výkon. Bydleli jsme tedy dva dny společně s našimi mentory v přepychovém hotelu u jezera a užívali si jako obyčejní turisté. A to doslova – prošli jsme si staré městské uličky, přesně takové, jaké je každý zná z asijských filmů, obědvali v místních rodinných re-

stauracích, kde nás hostili jen těmi nejlepšími specialitkami, kterých tedy mají v Koreji požehnaně (hlavně místní kim-chi je pro našince naprostá delikatesa..., nemožno komentovat, musíte ochutnat sami:–), čvachtali se v hotelovém bazénu, dováděli v prosklených výtazích, neustále si hráli s výrobníkem na led atakdále, atakdále. Po aklimatizačním rozkoukání si nás převzali organizátoři (od nichž jsme dokonce dostali i český mluvčího průvodce!) a převezli nás do kolejního kampusu, kde bydleli i všichni ostatní studenti. Nová zábava začala a s ní i spousta nových nezapomenutelných zážitků – slavnostní zahájení s množstvím originálních performancí a především tolika oslavnými projevy, jak jen to bylo (ne)nesitelné, koncerty slavných korejských hudebních a tanečních skupin v jakékoliv podobě – od nejtradičnějších samulnori až po přeborníky v break dance a la asia, nespočet výletů luxusními autobusy s klimatizací a koženými sedačkami po širokém okolí do starobylých vesnic, kde jsme měli dokonce i tu možnost účastnit se tradičních rituálů přípravy čaje nebo si mohli vyzkoušet přípravu rýžových specialitek, či se pokusit uplést vlastní slaměné „konfekční“ doplňky, viděli jsme názorné ukázky národního bojového umění taekwondo, jež jsme si vyzkoušeli s elitními bojovníky i na vlastní kůži, navštívili jsme zábavní park, jenž byl jako ušitý na míru právě českému adrenalinovému družstvu stejně jako vodní

park s parádními tobogány a několika bazény s umělými vlnami, absolvovali jsme exkurzi do největší továrny Hyundai na světě atakdále, atakdále. Prostě (nezapomenutelná) memorable experience.

Mezinárodní studentské prostředí, jehož součástí jsme se rychle stali, byl podle mne další a snad i jeden z největších přínosů celé akce. Zahrát si volejbal s Venezuelci, Brazilci (Brazilkami), Španěly, Portugalci (Portugalkami), Malajsany, Australany a mnoha dalšími, na to se jen tak zapomenout nedá. Obrovským bonusem byla tzv. gala night, kde potkáte a poznáte spoustu cizích mentorů a osobností vědy, mezi nimiž se nezdědkou najde i nějaká ta světově uznávaná chemická „celebrita“, což také není k zahzení, ono se to přeci jen někdy může hodit, mít nějakou tu známost. No a pokud jde o závěrečné zakončení a předávání medailí z rukou těch nejvíce haj hore haj korejských chemických předsedů akademii věd či profesorů, kteří se honosí tolika oceněními, že je ani sebou raději nenosí, je to natolik dojmotvorné a zpamětinesmazatelné, že úvodní slova hlavního konferenciéra opravdu nabývají nadčasové platnosti: „We just wanted you to make an International Chemistry Olympiad a memorable experience!“

*Rudolf Piša
Gymnázium Třebíč*

Výuka chemie

Střední průmyslová škola chemická v Brně představuje obor Aplikovaná chemie – Farmaceutické substance

Z historie školy

Počátky chemického průmyslového školství v Brně úzce souvisí se založením první české Průmyslové školy textilní v roce 1919. Velké požadavky byly kladeny především na barvení tkanin, které je založeno na znalostech chemie. V roce 1922 bylo rozhodnuto rozdělit vyšší ročníky na obor tkalcovský a obor chemicko-textilní. V roce 1928 byla založena dvouletá Nižší chemicko-textilní škola a čtyřletá Vyšší chemicko-textilní škola. Ještě před 2. světovou válkou byla založena Vyšší škola chemická při Vyšší průmyslové škole textilní, která byla do Brna, do budovy na Francouzské ulici 101, přeložena z Liberce. Studium na této škole bylo specializováno na obor analytický a chemicko-textilní. V roce 1951 byla nově zřízena Vyšší průmyslová škola chemická, která opustila budovu na Francouzské ulici, a nový školní rok 1951/1952 byl zahájen na Vranovské ulici 65. Zde má škola své sídlo doposud.

Vývojem prošel název školy. Původní název z roku 1951 Vyšší průmyslová škola chemická byl v roce 1953 změněn na Průmyslovou školu chemickou a od roku 1966 zákonem, kdy všechny školy končící maturitní zkouškou

byly nazvány středními, Střední průmyslovou školu chemickou. Tento název nese škola dodnes.

Současnost školy

V letošním školním roce 2006/2007 studuje na SPŠCH 475 žáků v 16 třídách denního studia. Škola připravuje studenty ve 4 studijních oborech: 28 – 44 – M / 001 Aplikovaná chemie, 29 – 42 – M / 001 Analýza potravin, 78 – 42 – M / 001 Technické lyceum a 78 – 42 – M / 006 Přírodovědné lyceum. Obor Aplikovaná chemie má 3 zaměření – Analytická chemie, Farmaceutické substance a Výpočetní technika v chemii. Všechny obory denního studia jsou čtyřleté, ukončené maturitní zkouškou.

Kromě denního studia škola zajišťuje i dálkovou formu výuky. Učební plán je shodný s plánem studia denního a je rozložen do pěti let. Těžiště výuky je v individuálním studiu. Žáci absolvují pouze jedenkrát týdně (zpravidla v pondělí v odpoledních hodinách) konzultace a praktickou výuku v odborných laboratořích. Tato forma studia je určena pracujícím s ukončeným vzděláním, kteří chtějí získat úplné střední odborné vzdělání zakončené maturitní zkouškou, nebo se chtějí requalifikovat. V letošním školním roce probíhá výuka v jedné třídě dálkového studia 5. ročníku oboru 28 – 44 – M / 005 Aplikovaná chemie – Ochrana životního prostředí.

O celkovém dění na škole informují školní noviny



Laboratoř IAM

s názvem „Chemický občasník“, jejichž přispěvateli jsou nejen žáci, ale i pracovníci školy.

Kromě své základní výchovně-vzdělávací funkce věnuje škola velkou pozornost i dalším vzdělávacím činnostem, které jsou určeny nejen vlastním žákům, ale i veřejnosti.

Škola patří mezi organizátory Chemické olympiády různých kategorií a pořádá přípravný kurz pro postupující do mezinárodního soutěže Grand Prix Chimique. Za celou dobu existence soutěže měla škola mnoho vítězů v městských, oblastních i celostátních kolech. Do přípravy chemických olympiád a mezinárodních soutěží jsou zapojeni i vyučující školy jako autoři úloh a členové komisi.

Další významnou aktivitou školy je organizace Středoškolské odborné činnosti. Jde o dobrovolnou zájmovou činnost, kterou žáci uskutečňují na škole, na odborných pracovištích vysokých škol, výzkumných ústavech, laboratořích nebo individuálně. Výsledkem SOČ je vypracovaná odborná zpráva nebo učební pomůcka s dokumentací, která se předkládá k odbornému posouzení a následně je obhajována před odbornou porotou. Na škole má SOČ dlouholetou tradici a je organizátorem krajského kola této soutěže ve všech oborech. V loňském školním roce proběhl již 28. ročník SOČ. Obhájob se zúčastnilo 52 žáků, kteří obhajovali čtyři práce v oboru Zemědělství, potravinářství, lesní a vodní hospodářství, dvanáct prací v oboru Chemie, pět prací v oboru Biologie, dvě práce v oboru Zdravotnictví a po jedné práci v oborech Ochrana a tvorba životního prostředí a Fyzika. Sedm prací bylo navrženo k postupu do městského kola, ze kterého postoupily čtyři práce do kola krajského a všechny následně i na celostátní přehlídku.

Celostátní přehlídka SOČ se uskutečnila ve dnech 9.–11. 6. 2006 v Karlových Varech. V oboru Chemie nás reprezentovali žáci Tomáš Vlach a Luboš Žák s prací Příprava a studium vlastností negativních polymerních světlocitlivých vrstev na bázi Polyvinylalkoholu (PVAI), kteří se umístili na 8. místě, a žákyně Eva Dostalová a Jana Oborná s prací Studium procesu generace těkavých sloučenin vybraných prvků pro možnosti jejich speciace

v potravinářských matricích metodami atomové spektrometrie, které se umístily na 10. místě a zároveň získaly zvláštní cenu, kterou je Cena děkana Fakulty chemicko-technologické Univerzity Pardubice. V oboru Zdravotnictví nás reprezentoval žák Michal Svoboda, který se umístil s prací Analýza metalothioneinu jako prognostického markeru nádorových onemocnění na 3. místě. V oboru Zemědělství, potravinářství, lesní a vodní hospodářství nás reprezentovaly žákyně Michaela Fukarová a Simona Tesařová, které se umístily s prací Změny kvality vajec v průběhu snáškového období u nosnic na 8. místě.

Již několik let se naši žáci úspěšně zúčastňují Soutěže vědeckých a technických projektů středoškolské mládeže AMAVET.

Pro žáky ZŠ, kteří mají zájem o chemii, organizuje škola korespondenční kurz chemie KORCHEM. Ve školním roce 2006/2007 to bude již 14. ročník a počet žáků, kteří se ho účastní, se rok od roku zvyšuje. Kromě této soutěže jsou pro žáky 8. a 9. tříd ZŠ pořádány chemické kroužky, které každoročně probíhají na škole od října do dubna v laboratořích školy.

Obor Aplikovaná chemie – Farmaceutické substance

Studijní obor Aplikovaná chemie – Farmaceutické substance byl na SPŠCH Brno poprvé otevřen ve školním roce 1998/1999, od té doby tedy školu opustilo 5 ročníků absolventů tohoto oboru. Nyní je na škole otevřeno po jedné třídě v prvním, třetí a čtvrtém ročníku a ve druhém ročníku polovina třídy.

Délka studia je 4 roky a studium je denní. Obor je určen pro hochy a dívky. Základními podmínkami pro přijetí je úspěšné ukončení základní školy, úspěšné absolvování přijímacího řízení a zdravotní způsobilost uchazeče. Studium je ukončeno maturitní zkouškou. Dosazené vzdělání je úplně střední odborné. Absolventi studijního oboru, kteří úspěšně vykonali maturitní zkoušku, se mohou ucházet o studium na vyšších odborných a vysokých školách.

Obsah výchovy a vzdělávání je stanoven tak, aby žáci mohli po úspěšném absolvování studia kvalifikovaně vykonávat činnosti, které jsou součástí profilu absolventa oboru, a aby byli připraveni pro vysokoškolské studium. Poskytované vzdělání má všeobecnou a odbornou složku. Všeobecnou složku vzdělávání poskytují žákům povinné předměty jazykové (český jazyk a literatura, anglický jazyk a německý jazyk), společenskovední (občanská nauka, dějepis), matematicko-přírodovědné (matematika, fyzika, základy ekologie), tělesná výchova a případně předměty volitelné a nepovinné.

Složku odborného vzdělávání tvoří povinné základní a profilující předměty spolu s předměty výběrovými a nepovinnými. Základní odborné učivo umožňuje žákům, aby si osvojili širší vědomosti a nezbytné dovednosti a návyky, zejména logické myšlení, uplatňování získaných vědomostí při řešení praktických úkolů a správné pracovní návyky. Tvoří základ odborné složky profilu absolventa. Řadí se sem učivo předmětů chemie, chemická laboratorní cvičení, analytická chemie, chemická technologie, stroj-

nictví, elektrotechnika, výpočetní technika a ekonomika.

Učivo profilujících předmětů vytváří prostor pro odbornou specializaci v souladu se specifickou částí profilu absolventa a určuje zaměření studijního oboru. Učivo těchto odborných předmětů je koncipováno jako dynamický systém umožňující uplatnění absolventů v nových technických, technologických, ekologických a ekonomických podmínkách. Profilující odborné předměty jsou biochemie, chemie léčiv a chemická technika.

Výběrové a volitelné předměty pomáhají dotvářet odborný profil žáka a rozšiřují jeho všeobecné vzdělání. Stanoví je škola s ohledem na potřeby regionu, profesní a zájmovou orientaci žáků. Příležitost k uplatnění individuálních zájmů a k rozšíření všeobecného i odborného vzdělání nad rámec povinného počtu hodin dává žákům učivo nepovinných předmětů.

Metody a formy výchovy a vzdělávání v jednotlivých vyučovacích předmětech studijního oboru jsou determinovány cíli, obsahem a koncepcí organizace výchovy a vzdělávání ve škole. V tomto rámci vyučující volí nejvhodnější metody a formy ke splnění dílčích výchovně vzdělávacích cílů konkrétních vyučovacích jednotek. Ve všech formách vyučování ve škole i mimo školu jsou respektována platná právní ustanovení, příslušná prováděcí vládní a resortní nařízení a vyhlášky, normy a předpisy pojednávající

o bezpečnosti a ochraně zdraví při práci.

Absolvent studijního oboru je po úspěšném vykonání maturitní zkoušky připraven se uplatnit jako technický, technicko-ekonomický a technicko-ekologický pracovník v oblasti:

- technické přípravy a technologického řízení chemických, chemicko-fyzikálních, chemicko-ekologických, farmaceutických a jiných výroby,
- chemické kontrolní analýzy,
- výzkumu a vývoje,
- monitorování, ochrany a tvorby životního prostředí,
- informačních technologií v chemickém průmyslu,
- hygienických službách a odpadovém hospodářství,
- státní správy.

Po čtyřech letech studia, která jsou zakončena úspěšným absolvováním maturitní zkoušky, většina žáků, po zvládnutí přijímacích zkoušek, pokračuje ve studiu na vysoké škole. V Brně jsou to zejména Chemická fakulta VUT, Veterinární a farmaceutická univerzita, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita a Přírodovědecké fakulty MU. Část absolventů oboru odchází ze školy přímo do praxe a je třeba poznamenat, že ze všech pracovišť přicházejí velmi pochvalné reference.

*Ing. Zdenka Kučerová
kucerova@spschbr.cz*

Diskuse

Volnost v laboratoři?

Už třetím rokem studuji chemii na Pedagogické fakultě UK v Praze. Po celou dobu mám cíl stát se učitelem chemie, i když mě stále někdo utvrzuje v tom, že tato cesta není tou nejschůdnější.

Loni jsem se přihlásil jako pomocná vědecká pracovní síla na Katedře chemie, abych tak s několika kolegy měl k chemii blíže než pár metrů z posluchárny k tabuli.

Myšlenka, o níž jsem se rozhodl napsat, mě napadla až v září tohoto roku. Dostali jsme totiž možnost podílet se na přípravě pokusů, které budou spolužáci provádět v předmětech Laboratorní technika a Cvičení z analytické chemie. Tímto jsme získali možnost mít na sobě apartní, bílé pláště v míře více než hojné.

Ze středoškolských praktik znám ten pocit, který nutně váže každého, kdo v laboratoři není dostatečně často a dlouho. Sklo mu připadá moc křehké, než aby na něj nasazoval tvrdou gumovou hadici k chlazení vodou, v obsazích kádinek a zkumavek má zmatek. Jak dostatečně „chemicky“ zvládnout danou techniku? Jak se s jistotou dopočítat požadované hodnoty? Tříčtvrtěhodinové cvičení nedá jistotu výpočtu a na práci doma se v tom kvapu nespolehne. K tomu všemu je tu ještě hrozba poleptání či popálení, a aby toho na studenta nebylo málo, je tady strážák – známkovací systém.

Obavy ze zdravotní nebo materiální újmy řeší student

déle než samotnou práci. Částečně je to menší hodinovou dotací, ale svou úlohu zde hraje i správný postup a známka. Po jisté době, kdy ze mě spadl strach ze skla, a kdy jsem přepočty všeho druhu několikrát opakoval, jsem objevil nový rozměr laboratorních prací. Jistota při práci s nádobím, látkami a výpočty ve spojení s volností bez známkového omezení způsobila, že jsem danou práci dělal rád, se skutečným zájmem o chemii a o výsledek, nikoli známku. Tento edukační pokrok se mi zdá hodný povšimnutí. Toto je ona pozitivní motivace do předmětu.

Nabízí se zde otázka, jak a jestli vůbec hodnotit studenty v laboratořích. Radši bych měl v laboratoři lidi, kteří se nebojí pracovat s nádobím, jsou si jistí, nemusejí se slepě držet postupu, když mají elegantnější způsob. Hodnocení podobných typů výuky je obtížné, ale zrovna v tomto vede k formálnímu vzdělání, které učitelé nemůže stačit.

Otázkou je, co bude studenty nutit připravovat se na takovéto hodiny. Budeme-li chtít držet se pedagogického optimismu, pak to bude jejich touha po poznání.

Je to zrovna praktická stránka, která může na středních školách nadchnout budoucí vysokoškolské studenty chemie, tak proč je odrazovat stísnějším pocitem, který většinou zažívají po vstupu do laboratoře?

*Martin Rusek
posluchač Pedagogické fakulty UK v Praze*

Členská oznámení a služby

Docenti jmenovaní od 5.5.2006 do 1.11.2006

Doc. RNDr. Eva Anzenbacherová, CSc.
pro obor lékařská chemie a biochemie, UP Olomouc

Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.
pro obor makromolekulární chemie VŠCHT Praha

Doc. Ing. Jiří Hanusek, Ph.D.
pro obor organická chemie, Univerzita Pardubice

Doc. RNDr. Petr Hrdlička, CSc.
pro obor zemědělská chemie, MZLU Brno

Doc. Ing. René Kizek, Ph.D.
pro obor zemědělská chemie, MZLU Brno

Doc. Ing. Richard Koplík, Dr.
pro obor chemie a analýza potravin, VŠCHT Praha

Doc. Ing. Tomáš Moucha, Dr.
pro obor chemické inženýrství, VŠCHT Praha

Doc. M.Sc. Nabanita Saha, Ph.D.
pro obor technologie makromolekulárních látek, UTB Zlín

Prof. RNDr. Richard Hampl, DrSc.
pro obor biochemie
na návrh Vědecké rady Univerzity Karlovy v Praze

Prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.
pro obor chemie a technologie anorganických materiálů
na návrh Vědecké rady Vysoké školy chemicko-
technologické v Praze

Prof. Ing. Vratislav Chromý, CSc.
pro obor analytická chemie
na návrh Vědecké rady Masarykovy univerzity

Prof. Ing. Alexander Krakovský, CSc.
pro obor bezpečnost průmyslu, větrání a požární ochrana
na návrh Vědecké rady Vysoké školy báňské - Technické
univerzity Ostrava

Prof. Ing. Vladimír Majer, CSc.
pro obor fyzikální chemie
na návrh Vědecké rady Vysoké školy chemicko-
technologické v Praze

Profesoři jmenovaní s účinností od 6. listopadu 2006

Prof. MUDr. Radim Černý, CSc.
pro obor lékařská chemie a biochemie
na návrh Vědecké rady Univerzity Karlovy v Praze

Prof. MUDr. Jiří Forejt, DrSc.
pro obor genetika, molekulární biologie a virologie
na návrh Vědecké rady Univerzity Karlovy v Praze

Akademie věd ČR udělila v chemických vědách tituly doktor věd (DSc.):

Ing. Jiří Rais, CSc., DSc.
prof. RNDr. Vladimír Král, CSc., DSc.
Ing. Michal Hocek, CSc., DSc.
doc. Martin Hof, Dr., DSc.
prof. RNDr. Ladislav Kavan, CSc., DSc.

Blahopřejeme

Osobní zprávy

Pětašedesátiny prof. Dr. Václava Pačese, DrSc.

Při zamýšlení nad životní cestou Václava Pačese napadne leckoho, a není to nápad nepřipadný, že jde o dítě Štěstěny. Avšak začtete-li se do jeho životopisu, uvidíte, že to není právě trefný popis. V jeho životě se totiž vyskytlo vskutku dost, dílem nemalých, překážek. To, že se jeho cesta jeví hladká a veskrze vlnitá, je dáno jeho skautskou duší, jež má dva výrazné rysy. Je to duše udatná a duše usměvavá. A tak ve chvílích trampot a obtíží si nestěžuje

a nikdy je nestaví na odív; nese je mužně.

Ovšem dobře si pamatuji, že jsem před pěti lety připomněl v našem časopise Pačesovy šedesátiny (Chem. Listy 96, 120 (2002).) Svůj tehdejší příspěvek jsem bral před časem do ruky v dobré víře, že tam naleznu doklady o tom, co jsem neprávem opomenul. Avšak co čert nechtěl: ten příspěvek jsem, při vší sebekritičnosti, shledal spravedlivým a, pokud jde o hlavní body a rysy jeho života, úplným. A tak jsem se rozhodl na něj navázat. Poznamenal běh života přechod od šedesátin k pětašedesátinám

oslavence? Nepřilíš a to proto, že se těší stejně duševní i fyzické kondici jako před pěti lety. Navíc od mládí byl vždy distingovaný džentlmen a zůstává stejně otevřený, stejně přímý, stejně korektní a stejně rozhodný jako byl dříve. A přece, přece k něčemu došlo. Uvedu to konstatováním, že ne jeden muž dovede na rožni připravit kotletu či roštěnku. To je však od opravdového vaření vzdálené o velký krok. A Václav získal k tomuto vaření, skutečnému vaření, opravdovou náklonnost a realizuje ji se zkušenostmi experimentálního biochemika. A tak pro něho dnes připravit např. opravdu dokonalé plněné papriky, takové jaké připravují obdivované hospodyně, není žádná potíž. Toho, co dovede v kuchyni, je však mnohem více. Ale spou mě se to jeví jako výraz opravdového zrání jeho duše. Co si jako stárnutí vzácného vína.

Pojďme však k odbornému dílu. Jako ředitel Ústavu molekulární genetiky AV s velikým úsilím, nasazením a fantazií pracoval o přípravě stavby nového ústavu. Realizace věru náročného projektu probíhá zdárně, a tak v nedaleké budoucnosti bude dílo dokončeno. Václavovo badatelství a mnohé další jeho aktivity to neohrozilo. A tak v roce 2005 byl Akademickým sněmem zvolen třetím předsedou Akademie věd České republiky. Jeho kolegialita a neúplatnost, jeho opravdu široké znalosti v oblasti věd přírodních i humanitních, jeho čest a ráznost skautského vůdce, jsou zárukou kvality bytosti stojící v čele významné části badatelské obce. Jako předseda Akademie s lehkostí (někdy možná jen zdánlivou lehkostí, neb jde vesměs o namáhavé úkoly) zvládá široké spektrum povinností: s radostí a připraven navštěvuje ústavy AV v ČR, udržuje kontakty s průmyslovou oblastí (to, že tyto kontakty nevedou častěji k realizacím *není* jeho chybou), spolupracuje úspěšně s celou oblastí vysokého školství, má čas i na gymnazisty a na popularizaci. A všichni víme, že je velice zdatným popularizátorem. Konečně ke stykům se zahraničím přispívá dočista intenzivně na moc pěkné úrovni.

Václav Pačes přispěl významně k prohloubení kontaktů s politickou sférou. To se týká jak moci výkonné, tak moci zákonodárné, jakož i kontaktů s prezidentem republiky. Dokladem toho, mimo jiné, je, že byl vážným kandidátem na místo předsedy vlády ČR, ovšem vlády, která by nebyla výrazně stranicko-politická. Musím však dodat, že mě mrzí, že některým politikům uniká, že nerespektováním vybraných Pačesových doporučení je poškozována jak naše republika, tak i věda.

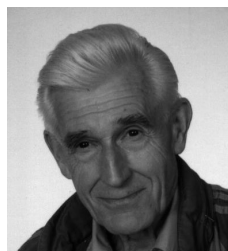
Šťastný domov rodiny Pačesových je v prvé řadě dán jeho ženou Magdou, která po léta udržuje s obětavostí vše v hladkém chodu. K atmosféře rodiny přispívají zdárně oba synové – úspěšní badatelé, Jan (40) a Ondřej (30) se svými rodinami. Tu a tam Magda byla pár dní mimo domov; před odjezdem vše nachystala. Jednou, když syn Jan byl malý chlapec, byly v lednici připraveny vařené nudle, maso a tvaroh. Václav si patrně pochutnal, se synem to bylo horší. Při malém výslechu maminkou se ukázalo, že nudle dostal studené a místo tvarohu a cukru byly posypány sunarem. Mnozí to známe, je to důsledek badatelské roztržitosti. Svědčí o ni i příběh z doby nedávné. Magda byla na služební cestě a Václav pozval amerického kolegu

na projížďku Posázavím. S nedávno koupenými krásnými bicykly na střeše auta vyzvedl Václav na Smíchově kolegu, s nímž živě konverzoval a když už byl na Smíchově, roztržitost ho dovedla k obchodnímu středisku Carefour, kam původně nezamýšlel zajet. Vrátit se nebylo možno. Na neštěstí projektant garáže nepočítal s bicykly na střeše auta. Ani se neptejte, jak to dopadlo. Naštěstí s rukou na srdci nutno přiznat, že jak auto, tak bicykly nebyly odepřány.

Zpět k dílu oslavence. Není týdne, kdy by nestrávil alespoň půlden či den v ústavu. Je stejně dobrým, zasvěceným a kritickým partnerem v diskusích o pracích, jež jsou ve stavu zrodu či končení, jakým býval v minulosti. Udivuje mne, že, ač pod tlakem mnoha různorodých povinností, udržuje působivý kontakt se svým mocně se rozvíjícím oborem.

Pane předsedo, milý Václave, zvedám číši vína k přípitku k Tvým narozeninám s pocitem, že se v duchu mnozí kolegové k tomuto přípitku připojí: Přeji Ti zdraví, radost z díla a radost z Tvé rodiny.

Rudolf Zahradník



Osmdesát let prof. Ing. Dr. Jaromíra Horáka, DrSc.

Dne 7. ledna 2007 oslavil své kulaté osmdesáté narozeniny prof. Ing. Dr. Jaromír Horák, DrSc. Je rodákem z Jimramova na Českomoravské vysočině, kam se vždy rád vrací. Po vystudování gymnázia v blízké Poličce absolvoval Vysokou školu technickou Eduarda Beneše v Brně (obor chemické inženýrství) a v roce 1950 začal pracovat v tehdejších Zkušebnách ministerstva těžkého strojírenství. Od roku 1953 do dnešní doby je jeho život spjat s pedagogickým a vědecko-výzkumným působením na VŠCHT Pardubice (nynější Fakultě chemicko-technologické Univerzity Pardubice). V letech 1990–1992 vykonával funkci vedoucího Katedry obecné a anorganické chemie (KOAnCH). Po odchodu do důchodu v roce 1995 je nadále aktivně zapojen do vědecko-výzkumné práce na této katedře a ve Společné laboratoři chemie pevných látek Univerzity Pardubice a AV ČR při řešení projektů z oblasti chemie pevných látek. Navíc působí v Ústavu anorganické chemie AV ČR v Řeži.

Činnost prof. Horáka jako vysokoškolského učitele byla zpočátku orientována na výuku obecné a anorganické chemie. Díky jeho zájmu o problematiku chemie pevných látek byl na počátku 60. let u zrodu nového studijního oboru, jehož náplní bylo sledování relací mezi technologií přípravy, poruchami v krystalové struktuře (odchylkami od stechiometrie) a odpovídajícími fyzikálními a chemickými vlastnostmi pevných látek. Původní studijní obor „Výroba velmi čistých látek“ položil základy pro vznik studijního oboru, nyní na FCHT Univerzity Pardubice studovaného, „Materiálového inženýrství“. Pod vedením prof. Horáka

tento obor absolvovalo několik desítek diplomantů a doktorandů. Pro své hluboké znalosti z oblasti chemie a fyziky pevných látek, osobní vlastnosti a citlivý přístup ke studentům byl mezi nimi i svými kolegy po právu oblíbený a vážený.

Od počátku svého působení na vysoké škole se zabýval problematikou chemie a technologie pevných látek. Předmětem jeho vědecké práce byla zpočátku příprava chalkogenidů sfaleritického a wurtzitického typu $A^{II}B^{VI}$ a studium vlivu příměsí na jejich luminiscenci. Další oblast jeho zájmu představovala problematika přípravy monokrystalů sloučenin $A^VB^VI C^{VII}$, např. SbSI, BiSI, s významnými polovodivými a feroelektrickými vlastnostmi. Těžištěm jeho vědecko-výzkumné práce bylo od začátku 70. let, a nadále je, sledování vztahů mezi povahou bodových poruch v krystalové struktuře, charakterem chemické vazby a korespondujícími polovodivými vlastnostmi chalkogenidů tetradymitového typu Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 a Sb_2Te_3 , které jsou základem materiálů pro termoelektrické aplikace – pro konstrukci termogenerátorů a chladicích elementů, pracujících v oblasti laboratorní teploty. Skupina pracovníků KOAnCH pod jeho vedením systematicky studovala souvislosti mezi povahou bodových i strukturních poruch a odpovídajícími vlastnostmi charakterizujícími transport náboje a tepla v krystalech binárních i vícetrojčkových. Předmětem jejich zájmu byly i vlastnosti optické. Výsledky mnohaleté práce byly publikovány převážně v zahraničních odborných časopisech a prezentovány na vědeckých konferencích jak doma, tak v zahraničí. Významným oceněním práce prof. Horáka v této oblasti je skutečnost, že se roku 1991 stal členem společnosti Deutsche Bunsengesellschaft. V roce 2003 obdržel z rukou tehdejší předsedkyně Akademie věd České republiky doc. RNDr. Heleny Illnerové, DrSc. medaili J. Heyrovského za zásluhy v chemických vědách. Prof. Jaromír Horák se tak stal 45. nositelem této medaile.

Na základě ohlasu publikovaných výsledků výzkumu krystalů tetradymitového typu pracovní skupina, vedená prof. Horákem rozvinula kontakty s celou řadou zahraničních institucí, z nichž lze zmínit velice úzkou spolupráci se Sektion Physik MLU Halle Wittenberg, Katedrou fyziky nízkých teplot MGU Moskva, 1. Physikalisches Institut RWTH Aachen. Za zvláště významnou lze pak pokládat úzkou spolupráci s Department of Physics University of Michigan, která je v současné době nadále rozvíjena – je zaměřena na řešení jak otázek teoretických, tak i problematiku praktického uplatnění studovaných krystalů.

V rámci mezinárodní spolupráce prof. Horák působil v letech 1968–1970 v Laboratoire de Physique des Solides Bellevue-Meudon Paříž, dále absolvoval kratší pobyty v Laboratoire Infrarouge University Montpellier a na 1. Physikalisches Institut RWTH Aachen.

Obor chemie pevných látek, orientovaný na problematiku přípravy a charakterizace nových materiálů, zejména ternárních krystalů tetradymitového typu, jejichž studium prof. Horák inicioval, nadále, za jeho nemalého přispění, rozvíjí skupina jeho bývalých studentů, nyní působících na FCHT Univerzity Pardubice. Prof. Horák se i v současné

době stále podílí na výzkumech v tomto oboru ve spolupráci s pracovníky KOAnCH a Společné laboratoře chemie pevných látek AV ČR a Univerzity Pardubice i v Ústavu anorganické chemie AV ČR.

Prof. Jaromír Horák je znám jako velmi společenský člověk, který si svým přívětivým vystupováním získal řadu přátel. Své vysoké postavy využíval i k bohatému sportovnímu životu. Hrál závodně volejbal ještě po své šedesátce a jeho tenisoví soupeři vědí, jak těžké bylo prohodit jej na síti díky jeho rozpětí paží. Všichni, kdo prof. Horáka známe a vážíme si ho, mu přejeme do dalších let neutuchající životní elán, hodně optimismu a pevného zdraví.

Petr Lošťák
Ladislav Koudelka



Prof. Ing. Miroslav Kaloč, CSc. sedmdesátníkem

Prvého listopadu oslavil své 70. narozeniny významný koksárenský specialista, vysokoškolský pedagog a dlouholetý spolupracovník početné řady průmyslových firem prof. Ing. Miroslav Kaloč, CSc.

Celý tvůrčí i pedagogický život prof. Kaloče je spjat s koksochemií, uhelnou chemií a chemií uhlíku. Této problematice se profesně věnuje již od roku 1959, kdy ukončil svá vysokoškolská studia na Hutnické fakultě tehdejší Vysoké školy báňské v Ostravě. S VŠB (dnes VŠB-TUO – Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava) spojil celý svůj odborný život a na ní si průběžně zvyšoval svou odbornou kvalifikaci. V roce 1966 obhájil kandidátskou disertační práci na téma „Problémy karbonizace smoly“, v roce 1971 byl jmenován docentem pro obor „Koksárenství“ a v roce 1988 byl jmenován profesorem pro obor „Chemie a technologie paliv“.

Ve své činnosti vysokoškolského pedagoga na VŠB se věnoval nejen tradičně přednášeným předmětům (Koksárenství, Technologie tuhých paliv apod.), ale do výukového procesu zavedl i řadu nově orientovaných odborných předmětů (např. Energochemie uhlí, Uhlíkaté a keramické materiály, Průmyslový uhlík atd.). V rámci této pedagogické činnosti vydal celkem 22 vysokoškolských skript a vychoval početnou řadu inženýrů. Významná je i jeho školitelská činnost a vedení doktorandů. Do letošního roku pod jeho vedením obhájilo disertační resp. doktorskou práci 30 doktorandů. Bohatě je také jeho působení v oblasti oponentského a recenzního posuzování diplomových, disertačních i habilitačních prací, posuzování nejrůznějších studií, grantů a projektů.

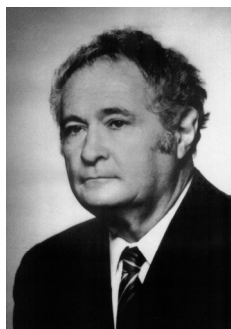
Hlavním těžištěm vědecké, odborné a výzkumné činnosti prof. Kaloče se stala problematika strukturních a texturních změn uhelné hmoty v průběhu její tepelné expozice, chemie uhlí a chemie uhlíku. V této oblasti dosáhl prof. Kaloč mezinárodního věhlasu, jehož důkazem je

např. členství v německé společnosti Verein Deutschen Kokerei Fachleute. Výsledkem jeho práce je autorství neb spoluautorství celkem 114 publikovaných odborných sdělení (z toho 39 v renomovaných zahraničních časopisech), bohatá citovanost jeho prací ve vědecké i odborné literatuře, 119 přednášek na vědeckých konferencích (z toho 89 v zahraničí, včetně Číny a Austrálie), autorství nebo spoluautorství 3 knih a 161 vědecko-výzkumných, vědeckotechnických a technických zpráv. V posledních letech se odborný zájem prof. Kaloče rozšířil i na studium uhlíkatých sorbetů, zpracování odpadů a biomasy, kompozitních materiálů a především uhlíkových membrán, což řeší v rámci projektů MŽP ČR a grantů GA ČR. Charakteristickým rysem profesního působení jubilanta je trvalé úzké sepnutí s průmyslovou praxí, s ostravskými koksovny, doly a hutními i chemickými podniky.

Jako ocenění dosavadní práce prof. Kaloče mu předal prof. Taraba, předseda ostravské pobočky České společnosti chemické, spolu s předsedkyní a místopředsedou ČSCH prof. J. Ulrichovou a prof. V. Šimánkem i zástupcem České společnosti průmyslové chemie doc. J. Vymětalem Cenu Viléma Bauera. Tato cena je udělována významným pedagogům za přínos k výuce chemie a byla jubilantovi předána v kruhu jeho přátel a spolupracovníků na VŠB-TUO v Ostravě.

K významnému životnímu jubileu přejeme panu profesorovi Kaločovi jménem jeho bývalých i současných spolupracovníků, žáků a přátel pevně zdraví, hodně pohody, radosti ze života a plnou množinu dalších úspěšných nápadů pro rozvoj chemie uhlí i uhlíku.

za všechny Jan Vymětal



Za profesorem Eduardem Růžičkou

Universitní profesor, RNDr. Eduard Růžička, CSc., se narodil 10. prosince 1917 ve Zbýňově u Rájeckých Teplíc. Opustil nás při téměř nedožitých devadesátinách, 30. září 2006. Jeho život byl plnohodnotný a naplněný.

Po maturitě v Žilině jeho studium na Přírodovědecké fakultě v Brně přerušila 2. světová válka. V této době se vrátil na Slovensko a aktivně se účastnil odbojových aktivit vedoucích k poválečné konstituci Československé republiky.

Po válce se ihned vrátil do Brna k dokončení vysokoškolského studia na Masarykově univerzitě. Absolvoval v roce 1946. Zde také obdržel doktorát RNDr. jako žák prof. Arnošta Okáče v roce 1948.

Již před obhajobou doktorátu přijal místo asistenta na obnovené Univerzitě Palackého v Olomouci v rámci tzv. „bienia přírodních věd“. Spolu s prof. Mečislavem Kurašem se stal hlavním projektantem a organizátorem dalšího vývoje přírodovědného studia a výzkumu v oboru chemie

na teprve připravované, samostatné Přírodovědecké fakultě UP. Cíleně ke konstituování přírodovědné chemie na UP působil jako proděkan „Vysoké školy pedagogické“ v letech 1954–1960.

Měl nepochybný podíl na vzniku samostatné Přírodovědecké fakulty UP v roce 1960, sám se stal vedoucím, tehdy trochu velké, ale dokonale spolupracující, Katedry organické, analytické a fyzikální chemie.

Na tomto místě musíme prof. Růžičkovi vyjádřit první dík a obdiv. My, kteří jsme na katedru se složitým jménem nastupovali koncem 50. a počátkem 60. let a byli jsme pro pana profesora až do tohoto roku „mládenci“, jsme se tehdy diskusí a spoluprací s „organiky“ a „fyzikálníky“ jako „analytici“ naučili to, co hodnotí naši spolupracovníci a studenti dodnes. Teprve později jsem také zjistil, že prof. Růžička při postupné specializaci na svůj bytostní obor analytické chemie, promyšleně přijímá jako asistenty absolventy z Bratislavy, Brna, Pardubic a tak v rámci tehdejší ČSR předjímá to, co se dnes děje v rámci Evropy.

Nelze také ovšem pominout vlastní pedagogickou a vědeckou potenci prof. Růžičky. To, že přednášel současně organickou a analytickou chemii pro učitele snad není hřích, absolventi tzv. učitelského studia dodnes oceňují propojení informací obou oborů. Měl také zásluhu na tom, že na přírodovědné chemii v Olomouci vznikl a dobře se konstitoval jako první obor pětiletého odborného studia obor *Analytické chemie*.

V době své maximální vědecké aktivity, v 50. až 70. letech, se věnoval tehdy prioritnímu tématu chudších analytických laboratoří: přípravě, základnímu výzkumu a využití analytických činidel. Jeho příspěvky *Využití oxazinových, fenothiazinových a diazinových barviv jako činidel a indikátorů* se staly součástí monografií a učebních textů (důkaz Sn^{2+} , BrO_3^- , redoxní titrace iontů i organických sloučenin). Specifickým, asi nedoceneným příspěvkem jsou reduktometrické titrace v amfiprotních polyhydroxy-rozpouštědlech typu polyglykolů.

Vědecké, koncepční a organizační zásluhy prof. Růžičky byly také oceněny, a to již za jeho života. Za svou činnost ve vědeckých radách vysokých škol, v Československé společnosti chemické, oborových radách Ministerstva školství, v Komisi expertů MŠ (předsednictví chemické sekce) obdržel řadu vyznamenání a medailí, mj.: Zlaté medaile Masarykovy univerzity v Brně, Vysoké školy báňské v Ostravě, samozřejmě medaile UP v Olomouci, Hanušova medaile Československé společnosti chemické a Vyznamenání za vynikající práci převzal z rukou ministra školství prof. Hájka v prosinci roku 1967. V roce 2003 při slavnosti k 50. výročí vzniku samostatné Přírodovědecké fakulty obdržel poslední, mimořádnou zlatou medaili naší univerzity jako zakladatel přírodovědné chemie v Olomouci.

Pan profesor měl rád společnost, byl velmi přátelský, vtipný glosátor dění a na sportovních výletech nás udivoval bravurní fotbalovou technikou.

Závěrem bych rád poděkoval prof. Růžičkovi jako diplomatovi. Musím konstatovat, že po roce 1969 „přežil“ asi jako jediný nestranný, „vyškrtnutý“ vedoucí katedry

na fakultě a to až do odchodu do důchodu v roce 1982. To, samo o sobě by mohlo být interpretováno i negativně. Zároveň ovšem dobře vím, že naše, tehdy 30–40-letá „mládež“ byla v době „nové naděje“ a později i v počínajícím disentu velmi aktivní. Z pracovníků chemie na PřF UP nemusel odejít nikdo, mne se to týkalo bezprostředně, takže „pane Professore s láskou“ budeme na Vás i Vaši lidskou inteligenci vzpomínat s úctou.

za Vaše kolegy a žáky Zdeněk Stránský

Vzpomínka přednesená u příležitosti nedožitého osmdesátých narozenin doc. Dr. Ing. Karla Bláhy, CSc. na zasedání Hlavního výboru ČSCH dne 22.11.2006

Doc. Dr. Ing. Karel Bláha, CSc. (1926–1987), jeden z nejvýznamnějších poválečných českých chemiků se narodil ve Vejvanově v okrese Rokycany. Po maturitě na gymnáziu v Plzni studoval na Vysokém učení chemicko-technologického inženýrství v Praze, které absolvoval v roce 1949; o rok později tamtéž získal doktorát technických věd.

Deset let působil v Laboratoři heterocyklických sloučenin Československé akademie věd, kde se zabýval hlavně chemií alkaloidů. Laboratoř heterocyklických sloučenin byla založena v roce 1952 pro Prof. Lukeše – to byla tehdy obvyklá praxe, pro akademiky se zřizovala specializovaná pracoviště. Prof. Lukeš byl kromě vedení Laboratoře také vedoucím katedry organické chemie VŠCHT; zaměstnanci byli někteří pracovníci katedry a obě pracoviště byla personálně a materiálně propojena. Zmiňuji se o tom podrobněji, protože na tuto bohatýrskou dobu na technice doc. Bláha velmi často vzpomínal, prof. Lukeše si nesmírně vážil a při každé možné příležitosti se k němu hlásil jako ke svému nejdůležitějšímu učiteli. Nicméně v roce 1960 prof. Lukeš umírá, čímž se pro Karla Bláhu, a teď ho přesně ocituji, „stala půda na technice příliš horkou“, takže přechází spolu s několika dalšími známými českými chemiky v podobné situaci na ČSAV, kde ideologická hlediska hrála menší úlohu, a to do Ústavu organické chemie a biochemie. Tam působil ve skupině chemie peptidů vedené jedním z významných světových představitelů tohoto oboru Josefem Rudingerem, po jehož odchodu do emigrace se stává vedoucím skupiny. Karel Bláha přináší do skupiny zaměřené na syntézu rozsáhlé znalosti fyzikálních metod, které tehdy procházely svým zlatým obdobím. Rozhodujícím způsobem u nás přispěl k zavedení a rozšíření chiroptických přístupů, což souviselo s jeho hlubokým zájmem o stereochemii. Během pobytu na Polytechnic Institute of Brooklyn, USA, se pod vedením Murray Goodmana zabývá metodami studia konformace peptidů a bílkovin. V roce 1972 dokončuje a odevzdává doktorskou disertaci, další řízení je však zastaveno. V roce 1982 se v Praze konal pod jeho předsednictvím 12. sjezd Evropské peptidové společnosti. Toto perfektně zorganizované a úspěšné setkání bylo příležitostí pro světové peptidové



kapacity vyjádřit Karlu Bláhovi (již desátý rok nemohl cestovat do ciziny) podporu a úctu. Jeho postavení se zlepšuje až v osmdesátých letech – v roce 1982 se stává vedoucím oddělení organické chemie na ÚOCHB a později se mu opět otevírá možnost cestovat. Naposledy jsem s ním hovořil na oslavě jeho šedesátin. Byl plný naděje a dalších plánů – vše se zdálo být na dosah a jeho celoživotní neuvěřitelná píle se mohla nyní konečně zúročit na pozicích, kam již dávno patřil. Bohužel, osud mu vyměřil už jen jeden rok.

Doc. Bláha byl jedním z vědců obdařených schopností zaujmout přednáškou a byl proto velmi žádaný o proslovy na nejrůznějších sjezdech a konferencích. V roce 1969 se habilitoval na Lékařské fakultě Univerzity Palackého (u svého přítele profesora Františka Šantavého) a pravidelně potom jezdil do Olomouce přednášet. Že uměl poutavě přednášet o aminokyselinách a peptidech není tedy příliš překvapivé, i když zaujmout naše studenty lékařství čímkoli, co se týká chemie, není zrovna jednoduché. Nicméně ze všech přednášek si nejvíce pamatuji na tu, ke které byl přemluven někdy v sedmdesátých letech na olomoucké Filozofické fakultě. Byla to přednáška v rozsahu dvou vyučovacích hodin, pro studenty češtiny, o českém odborném jazyce: krásná, logická, brilantně podaná, která strhla k nadšenému přijetí jak mne, tak všechny přítomné studenty (studenti v té době na češtině asi neexistovali).

Další oblastí, ve které se projevila erudice Karla Bláhy, byla jeho činnost redaktorská a názvoslovná. Od roku 1957 byl redaktorem *Collection*, od roku 1962 šéfredaktorem až do svého odchodu. Je nepochybně jedním z těch, kteří mají rozhodující zásluhu na minulém i současném renomé tohoto časopisu. Od roku 1963 pracoval jako předseda komise pro nomenklaturu organické chemie Československé společnosti chemické, od roku 1969 jako člen komise pro organickou nomenklaturu IUPAC (dva roky byl místopředsedou této mezinárodní komise). Ve výčtu aktivit nelze zapomenout jeho obětavou práci v Československé společnosti chemické (1978 místopředseda, dále šéfredaktor *Bulletinu*), jmenovitě v tehdejší Pražské pobočce a ve skupině organické chemie, a při pořádání organických a farmaceutických „Liblic“.

Je autorem nebo spoluautorem více než 200 publika-

cí, 70 přehledných referátů a 5 monografií; dále byl jedním z hlavních autorů anglicko-českého a česko-anglického chemického slovníku, vydaného v roce 1988. Rád bych zde jeho monografie připomenul: *Jak psát o chemii* je útlý, krásný text, který vyšel ve dvou vydáních (1974, 1983) a já jej stále doporučuji jako nejlepší základní informaci pro začínající autory i s vědomím toho, že technické zpracování rukopisu je dnes diametrálně odlišné. O to je to četba zajímavější. *Nomenklaturu organické chemie* (spolu s M. Ferlesem a J. Staňkem), která vyšla ve třech vydáních, naposledy v roce 1985, držel v ruce s trochou nadšázky snad každý organický chemik, který působil v poslední třetině minulého století. Představy o tom, co je nezbytným minimem organické chemie, jsou shrnuty v textu *Organická chemie pro fyziky a fyzikální chemiky*, který sloužil hlavně pro postgraduální studenty. V roce 1966 vyšly *Základy stereochemie a konformačního rozboru* (spolu s O. Červinkou a J. Kovářem). Možná jste si všimli pojmu konformační *rozbor*, což je ovšem termín zcela nepoužívaný. Karel Bláha byl totiž vášnivým zastáncem tzv. konzervativního pravopisu. V šedesátých letech u nás panovala kuriozní situace, kdy dvě nakladatelství, vydávající převážnou většinu chemických textů, dodržovala odlišná pravidla. Academia užívala konzervativní pravopis, Státní nakladatelství technické literatury pravopis progresivní, bližší obecné češtině. *Základy stereochemie* měly tu smůlu, že vyšly u SNTL a než by Bláha připustil obálku se slovem *analýza*, tak použil výrazně český výraz *rozbor*. Kniha měla úspěch a brzy byla rozebrána, druhého vydání se však nedočkala, protože Jan Kovář odešel do ciziny.

Později (1971) byla vydána v Anglii v nakladatelství Iliffe. Bláhovým nejobsáhlejším dílem je téměř tisícistránková rešeršní monografie z řady „*Preparativní reakce v organické chemii*“ o organokovových sloučeninách. Na počátku sedmdesátých let ještě připravoval jako hlavní editor velkou příručku o fyzikálních metodách v organické chemii, téměř všechny kapitoly byly napsány, kniha nakonec nevyšla.

Měl jsem to štěstí, že jsem strávil v laboratoři doc. Bláhy necelé čtyři roky (1969–1972), v období kdy centrem jeho zájmu byly sloučeniny s netypickými amidovými (chcete-li peptidovými) vazbami, tzn. s vazbami v *cis*-konfiguraci, a pokud možno ještě navíc vychýlenými z planarity. Dále jsem měl tu čest s ním spolupracovat, i když už jen v omezeném rozsahu a na dálku z Olomouce ještě dalších 14 roků. Nemohu než stále vzpomínat a obdivovat jeho cit pro chemii, schopnost vidět řešení, ochotu vždy komukoli pomoci a přirozenou autoritu, jak u kolegů, kteří byli již sami výraznými osobnostmi, tak u začátečníků, jako jsem byl já. Jeho pracovní nasazení se bohužel nedalo označit jako zdravý životní styl; na ústavu byl od rána do večera bez jakékoli stravy kromě nikotinu a kofeinu a věnoval se tam chemii, doma, v noci se pak věnoval redakčním povinnostem a autorským závazkům.

Karel Bláha vykonal pro československou organickou chemii opravdu hodně. Snad si mohu dovolit říci za ostatní, že pro nás, jeho žáky a spolupracovníky, zůstává vzorem vědce a člověka, jakých není mnoho.

J. Vičar

Výročí a jubilea

Jubilanti v 2. čtvrtletí 2007

80 let

Prof. Ing. Dr. Tech. Jaro Komenda, CSc., (4.4.), PŘF MU Brno

Ing. Josef Sýkora, CSc., (20.4.), Litvínov

Prof. RNDr. Eva Smolková, DrSc., (27.4.), PŘF UK Praha

Prof. Ing. Bohumil Hájek, DrSc., (29.5.), VŠCHT Praha

Prof. Ing. Čestmír Černý, DrSc., (24.6.), VŠCHT Praha

75 let

Doc. Ing. Karel Štamberg, CSc., (3.4.), ČVUT Praha

Ing. Jaromír Kletečka, CSc., (4.4.), Ústav pro hosp. v zemědělství Praha

Ing. Miloslava Márová, (16.4.), ÚSVU Praha

Ing. Jiří Kliment, (19.4.), Fotochema Český Brod

MUDr. Pavel Chýle, CSc., (20.4.), STI potravinářského průmyslu

RNDr. Josef Halbych, CSc., (21.4.), PŘF UK Praha

Doc. Ing. Josef Panchartek, CSc., (14.5.), Univerzita Pardubice

RNDr. Anna Habersbergerová, CSc., (21.5.), ÚJV Řež u Prahy

Ing. Rudolf Mráz, (26.5.), VŠCHT Praha

Ing. Libuše Havlíčková, CSc., (10.6.), VÚOS Pardubice

Doc. Ing. Jiří Vlček, CSc., (24.6.), VŠCHT Praha

70 let

RNDr. Jiří Honzák, CSc., (5.4.), Český hydrometeorologický ústav Praha

RNDr. Jaroslava Medunová, (12.4.), SZŠ Ostrava

Ing. Jaroslav Mládek, (17.4.), OHS Most

Prof. Ing. Milan Kraitr, CSc., (18.4.) ZČU Plzeň

Ing. Pavel Řezníček, (25.4.), Druchema Praha

Prof. Ing. Lubomír Lapčák, DrSc., (6.5.), UTB Zlín

Ing. Karel Mocek, CSc., (6.5.), ÚFCH J. H. AV ČR Praha

Ing. Zdeněk Brož, CSc., (31.5.), ÚCHP Praha

65 let

Ing. Jaroslav Šebesta, (22.4.), Státní veterinární ústav Praha

Ing. Alena Cejnarová, (25.4.), ČKD polovodiče Praha
RNDr. Olga Čechová, CSc., (15.5.), FN Brno
Ing. Marie Matuchová, CSc., (23.5.), ČVUT Praha
Ing. Jaroslav Pata, CSc., (7.6.), VÚ bezpečnosti práce
Praha
Doc. RNDr. Jiří Fišer, CSc., (18.6.), PřF UK Praha
Ing. Josef Materna, (26.6.), MÚ Kralupy nad Vltavou
Ing. Rudolf Smrž, CSc., (28.6.), Synthron CZ Praha

60 let

RNDr. Jiří Bárta, (4.5.), Gymnázium Hlučín
RNDr. Miloš Demjanenko, CSc., (21.6.), Praha

Blahopřejeme

Zemřelí členové Společnosti

Ing. Dr. Tech. Karel Pospíšil, OHS Prostějov, zemřel
v červnu 2006 ve věku 83 let
Ing. Karel Setínek, CSc., ÚCHP AV ČR, zemřel
24. srpna 2006 ve věku 79 let
Prof. RNDr. Ivan Vavruch, DrSc., Ciba-Geigy, zemřel
16. září 2006 ve věku 87 let
Ing. Václav Řeřicha, SKVITR, zemřel 7. října 2006 ve
věku 85 let
Doc. RNDr. Jiří Banýr, CSc., zemřel 27. listopadu 2006
ve věku 71 let

Čest jejich památce