ChemZi

SLOVENSKÝ ČASOPIS O CHÉMII PRE CHEMICKÉ VZDELÁVANIE, VÝSKUM A PRIEMYSEL
Ročník **8** Číslo **1** Rok **2012** (leto)
ISSN 1336-7242

1762-2012, 250 rokov prvej technickej univerzity na svete, Bergakadémie v Banskej Štiavnici

Analytické štandardy a certifikované referenčné materiály na www.sigma-aldrich.com

- Štandardy pre analýzu životného prostredia vrátane izotopovo značených
- Štandardy pre Karl Fischerove titrácie
- Štandardy pre petrochémiu a výrobu biopalív
- Štandardy pre analýzu potravín vrátane mykotoxínov, GMO ...
- Forenzné a veterinárne štandardy
- CRM pre klinickú biochémiu a mikrobiológiu
- Štandardy pre spektroskopiu a fyzikálne metódy

- Novinka: **medzilaboratórne porovnávanie**
- 4 – 6 okružných testov za rok - prehľad analytov a harmonogram na požiadanie zašleme
- 2 ampule na testovanie (štandard s certifikátom na nastavenie prístroja a neznáma vzorka)
- Podrobnejšie na www.sigmaaldrich.com/rtccrm

- **Pre viac informácií kontaktujte náš technický servis**
  SVKorders@sial.com, tel: +421 2-555 71 562

SIGMA-ALDRICH

ChemZi

SLOVENSKÝ ČASOPIS
O CHÉMII
PRE CHEMICKÉ VZDELÁVANIE,
VÝSKUM
A PRIEMYSEL

3 **Editorial**

4 **Priemyselný profil**
Dynamitka, Dimitrovka, Istrochem
Od roku 1873 - dokedy? (tretia časť)

6 **Odborný článok**
Periodická precipitácia ako chemická oscilačná reakcia

7 *Potenciál medzi imobilnou a difúznou vrstvou - elektrokinetický alebo zeta potenciál*

8 *Elektrónová štruktúra: populárne versus presné metódy*

10 *Nanotribológia - chémia na pohybujúcich sa rozhraniach*

12 *Spektroskopická charakterizácia zlúčenín polytioféno metódou korelačného počítania fotónov*

14 *Štúdium optimálneho spôsobu syntézy vysoko účinných liečiv*

15 *Využitie laserovej filamentácie pri bezkontaktnej "stand-off" detekcii chemických látok*

16 *Spektrálne rozšírenie femtosekundových impulzov pri vysokých tlakoch*

17 *International Laser Centre, Bratislava*

18 **Aktuality SCHS**
Kandidáti na členov Predsedníctva SCHS pre funkčné obdobie 2013-2016

19 *Zasadnutie Asociácie slovenských chemických a farmaceutických spoločností (ASCHFS)*
Zasadnutie Slovenského národného komitétu Medzinárodnej únie pre čistú a aplikovanú chémiu (SNK IUPAC)

19 *Názvoslovné okienko, Ako prekladať anglický výraz nanotube*

20 *Mapa web stránky SCHS*

21 *Predstavujeme Ing. Máriu Omastovú, DrSc.*

22 *ChemPubSoc je časopisom aj slovenských chemikov*

23 *2011: A Stamp Oddysey*

25 **Nové knihy**
Jozef Tatiersky: Základné chemické výpočty
Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska

26 **Chemické horizonty**
Chemické horizonty - jarný cyklus 2012

27 *How to Predict Theoretical Quantitative Thermokinetic Parameters? Application to Halogenated Systems of Atmospheric Interest*

17 **Konferencie**
Partikulárne látky vo vede, priemysle a životnom prostredí

28 *XII. konferencia s medzinárodnou účasťou SÚČASNÝ STAV A PERSPEKTÍVY ANALYTICKEJ CHÉMIE V PRAXI ACP 2012*

29 *OS Medicínska chémia*
Záverečná konferencia projektu COST CM0602 – Inhibítory angiogenézy: dizajn, syntéza a aplikácia v biológii (ANGIOKEM) Smolenice 11. – 14. jún 2011

30 *54. Zjazd poľských chemikov*

31 *Bypos 2012*

32 *63. Zjazd chemikov - Errata*

33 *63. Zjazd chemikov*

34 *Jubilejný 60. zjazd Slovinskej chemickej spoločnosti*

34 **FCHPT**
Najlepšia technická fakulta na Slovensku

35 **História**
European Congress? European Society? ... and the First Institute of Technology since 1762

36 *250 rokov od založenia Banskej akadémie a výučby chémie v Banskej Štiavnici*

39 *Spomienka na prof. Ing. Dr. techn. Františka Valentina*

42 *Ukončenie osláv Medzinárodného roku chémie 2011 v Poľsku a oslava 100. výročia udelenia Nobelovej ceny Márie Skłodovskej-Curie*

43 *Mária CURIE-SKŁODOWSKA (1867 – 1934)*
2011 – Rok Márie Curie-Skłodowskej: aj rastliny nesú jej meno

44 **Profil osobnosti**
Profil Vedca roka 2011 – prof. Ing. Romana Boču, DrSc.

46 **Pedagogika**
Jednoduché zlúčeniny bóru na laboratórnych cvičeniach z anorganickej chémie, 2. časť

47 **Legislatíva**
Požiarna bezpečnosť pri manipulácii s horľavými kvapalinami v laboratóriu

48 *Čas na zmenu*

50 **Jubilanti**
K životnému jubileu doc. RNDr. Oľgy Hritzovej, CSc.
Jubilantka Prof. Ing. Eva Matisová, DrSc.

51 *Jadrový chemik profesor Pavol Rajec*

52 **Spomienka**
Za docentom RNDr. Petrom Kutschym, CSc.

SHIMADZU
Excellence in Science

UFMS

ULTRA FAST MASS SPECTROMETRY

Speed Beyond Comparison

Power Tower

The LCMS-8080 LC/MS/MS triple quadrupole's technology provides best-in-class sensitivity, focusing on quantitative analyses. Combined with the high-speed Shimadzu HPLC/UFLC front end systems with lowest carry-over market-wide, it is the perfect solution for compound detection in complex matrices.

- **Increased ionization efficiency**
  based on special technologies supporting the ionization process while removing neutral contaminants
- **Outstanding sensitivity**
  detecting trace levels of compounds in complex matrices
- **Easy to operate**
  providing seamless operation and a stress-free analysis environment thanks to LabSolution software platform
- **Special Tower design**
  with smallest foot print of any triple quadrupole MS to save lab space

Shimadzu's complete range of LCMS- and GCMS triple quadrupole mass spectrometers meet all demands of today's qualitative and quantitative analyses.

www.shimadzu.at

Rok 2012 a 250 ročná tradícia prvej technickej univerzity na svete a to na Slovensku

V tomto letnom čísle ChemZi predstavujeme bohatý rok 2012 na akcie rôzneho druhu. Prvým významným bodom je 250 výročie založenia Baníckej akadémie v Banskej Štiavnici v roku 1762. Táto škola bola, ako málokto vie, prvou technickou univerzitou na svete a tak môžeme byť právom hrdí, že sa to udialo na pôde terajšieho Slovenska, hoci škola bola samozrejme spoločná, rakúsko-uhorská. Výročie 1762-2012 si pripomenieme aj na celoeurópskom chemickom kongrese Euchems v Prahe, koncom augusta, kde bude prednáška venovaná Baníckej akadémii. Sme tiež hrdí, že táto prednáška veľkého kolektívu autorov, ba až pod gesciou SCHS, bola nominantom na cenu Euchems Lecture. Oslava tohto výročia sa chystá na Salamandrovom sprievode začiatkom septembra v Banskej Štiavnici. Táto akcia je veľmi dôstojným pokračovaním uplynulého roku, Medzinárodného roku chémie, IYC. Naším predchádzajúcim malým medzníkom na Slovensku bolo oživenie Incheby v podobe Chemistry Slovakia 2011. Aj tento rok budeme pokračovať v tradícii popularizácie chémie medzi odbornou i laickou verejnosťou na akcii v Inchebe začiatkom novembra. Je totiž dôležité, aby sme my, chemici, chémiu dostali do povedomia celej spoločnosti, ako neodmysliteľnú súčasť moderného bytia. Motív významu chémie, ale aj prítomnosť skutočných osobností chémie v našej histórii Vám bude predostreté v zimnom čísle. Toto číslo bude venované osobnosti Leopolda Antona Ruprechta, rodáka zo slovenského Smolníka, tretieho profesora chémie na Baníckej akadémii. A tak hľadiac na koniec roka, pripravujeme pre Vás toľko sľubované CD s obsahom výstavy Míľniky chémie, ktorá pozostáva zo zaujímavých posterov a je určená pre malých aj veľkých. Tento projekt predstavuje aktívnu podporu chémie voči verejnej mienke. A keď sme pri podporách, nedá mi apelovať, na tých , ktorí to ešte nestihli, aby zaplatili svoje členské v SCHS alebo prípadne zvážili vstup do SCHS, k čomu Vás vrelo vyzývame.

A len pre upresnenie, ak máte záujem dostávať tento časopis ChemZi bezplatne, stačí poslať email s Vaším menom a Vašou poštovou adresou na emailovú adresu velic@ilc.sk

Rád by som tiež v mene Slovenskej chemickej spoločnosti, vyzval jej členov o zaplatenie členského príspevku na rok 2012 osobne na sekretariáte SCHS, Radlinského 9, 1. posch., č. dv. 1111 v čase úradných hodín alebo cez

- internet banking na účet SCHS
Číslo účtu: 121632012
Kód banky: 0200
Končt. symbol: 0308
Variabilný symbol: rok alebo roky nezaplateného členského
Správa pre prijímateľa: meno a priezvisko
8 EURO členské pre riadneho člena
3 EURO členské pre študentov a dôchodcov, aj čestných členov
3 EURO zápisné

Na záver Vám prajem príjemné čítanie a listovanie nášho časopisu a budeme Vám veľmi povďační, ak nám naďalej budete posielať Vaše príspevky, ktoré vždy radi uverejníme.

D. Velič

ChemZi · ročník/volume 8 (2012), číslo/number 1 · Slovenský časopis o chémii pre chemické vzdelávanie, výskum a priemysel ● ISSN 1336-72 2 ● registr. číslo MK SR EV 2005/08 ● **Vychádza dva krát ročne** ● Vydáva: Slovenská chemická spoločnosť ● Redakčná rada: Dušan Velič, Monika Jerigová, Dalma Gyepesová, Marta Sališová, Milan Drábik, Zuzana Hloušková, Mária Omastová, Jozef Tatiersky, Michal Uher ● Edičná rada: Viktor Milata, Slovenská chemická spoločnosť; Jozef Kollár, Asociácia slovenských chemických a farmaceutických spoločností; Ivan Chodák, Slovenská akadémia vied; Roman Karlubík a Štefan Petkanič, Zväz chemického a farmaceutického priemyslu SR; Miloš Revús, Slovenská spoločnosť pre priemyselnú chémiu; Jozef Čižmárik, Slovenská farmaceutická spoločnosť; Jozef Markoš, Slovenská spoločnosť chemického inžinierstva; Ján Turňa, Slovenská spoločnosť pre biochémiu a molekulárnu biológiu; Vendelín Iro, Spoločnosť údržby, výroby a montáží podnikov chemického, farmaceutického a papierenského priemyslu; Edita Nováková, Ministerstvo hospodárstva SR; Jozef Mikulec, Slovnaft VÚRUP; Dušan Bakoš, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU; Ján Lešinský, Zväz slovenských vedecko-technických spoločností ● Podporili: Daniela Dörnerová, Sigma-Aldrich; Alexander Černák, Zentiva; Róbert Nádaskay, Merck; Jaromír Mlynár, Shimadzu ● ADRESA REDAKCIE: Slovenská chemická spoločnosť, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, IČO 178 900, IČ DPH 2020801563, telefón/phone + 21-2-59325299, fax + 21-2-52 95205 ● ADRESA PRE ZASIELANIE PRÍSPEVKOV: velic@ilc.sk ● FORMÁT PRÍSPEVKU: 1500 slov a max. ks farebných obrázkov, 750 slov a max. 2 ks farebných obrázkov, krátke oznamy a správy, jubilanti max. 350 slov a farebná fotografia, reklama ● **Odborné články sú recenzované** ● TLAČ: Danubiaservis,s.r.o., Rádiová 35, 821 0 Bratislava ● POČET VÝTLAČKOV: 1500 ● OBÁLKA: 1762 - 2012, 250 rokov prvej technickej univerzity na svete, Bergakadémie v Banskej Štiavnici ● Nevyžiadané príspevky nevraciame, redakcia si vyhradzuje právo skrátiť príspevok pri zachovaní jeho podstaty. Zverejnené informácie v ChemZi sa nie nutne zhodujú s názormi redakcie.

Dynamitka, Dimitrovka, Istrochem Od roku 1873 – dokedy?

(tretia časť)

4. Výroby zrodené z výskumu

Ak sme sa v prvých dvoch dieloch seriálu zamerali na históriu Dynamitky (Dimitrovky, Istrochemu), odteraz nás čaká virtuálna exkurzia po vybraných prevádzkach a technológiách. Najprv si všimneme dve oblasti, ktoré si vyžiadali relatívne najviac výskumu a vývoja: agrochemikálie (ochrana rastlín) a prísady do plastov.

Po 2. svetovej vojne bolo potrebné zvýšiť produktivitu poľnohospodárstva; navyše, vojnovými udalosťami došlo k zavlečeniu nových škodcov a chorôb úžitkových rastlín. Potreba agrochemikálií bola logickým dôsledkom. Z iniciatívy technického riaditeľa podniku Ing. Mikuláša Furdíka (neskôr profesora UK a významného slovenského chemika) vzniká hneď po vojne Výskumný ústav Dynamit-Nobel, so sídlom v zrekonštruovanej (vojnou poškodenej) administratívnej budove Dynamitky, pri Račianskej bráne. R. 1952 sa mení na samostatný Výsk. ústav agrochemickej technológie (VÚAgT), podriadený priamo rezortnému ministerstvu, ktorý sa s celoštátnou pôsobnosťou venoval prostriedkom ochrany rastlín – insekticídom, herbicídom, fungicídom a i. Paralelne existujúci závodný výskum, zameraný hlavne na gumárenské chemikálie a prísady do plastov, sa r.1976 transformoval na Výsk. ústav organickej technológie (VÚOT). Finále tohto spletitého vývoja predstavovalo zlúčenie oboch ústavov r. 1983, čím vznikol dnešný Výskumný ústav chemickej technológie (teraz VUCHT a.s.), na čele ktorého stál až do r. 1989 dovtedajší riaditeľ VÚOT Ing. Ján Mašek. VUCHT mal celoštátnu pôsobnosť, a viaceré tu vyvinuté technológie sa zrealizovali aj mimo Dimitrovky.

Treba priznať, že hlavnou náplňou týchto výskumných inštitúcií bolo kopírovanie západných výrobkov a technológií. Buď sa zavádzali deriváty, ktorým expirovala patentová ochrana, alebo sa (modifikáciou štruktúry, formulácie atď.) obchádzal patent, prípadne boli patentové práva pôvodných výrobcov ignorované. Konkrétne riešenie závisselo od toho, či mal byť daný produkt exportovaný aj na svetové trhy, alebo len v rámci socialistického tábora.

Nebola to vina samotných chemikov. Výskum zamestnával mnohých odborníkov, schopných vyvíjať aj originálne produkty, čo sa mnohokrát potvrdilo. Prevažná väčšina nových zlúčenín však poslúžila len na reprezentáciu výskumu, a skončila „v šuplíku“. Napriek proklamovaným ambicióznym cieľom, rezortné vedenie a štátostrana potichu zastávali postoj: pokiaľ nejde o vojenský sektor (kde je potrebný náskok pred nepriateľom), netreba riskovať s novými výrobkami; stačí kopírovať produkty overené praxou na Západe.

Obr. 9: Bývalá výrobňa Lindanu.

Z agrochemických výrob zavedených v Dimitrovke po 2.sv.vojne patrí medzi prvé produkcia DDT (1950); ako ďalší insekticíd pribudol HCH (hexachlórcyklohexán). Keď sa podarilo vyriešiť izoláciu aktívneho gama-izoméru (Lindan, pôvodne zavedený firmou ICI r.1942) zo zmesi stereoizomérov, postavila sa nová výrobňa (1957). Podľa pamätníkov patrila prevádzka Lindanu medzi najkrajšie - fotochemická adičná chlorácia benzénu prebiehala v sklených aparatúrach, prežiarených svetlom ortuťových výbojok. Po jej zrušení r. 1977 (vzhľadom na problém chronickej toxicity a perzistencie Lindanu v prírode) stojí budova výrobne už desaťročia prázdna, a zrejme je dodnes zamorená chlórovanými uhľovodíkmi. Z ďalších insekticídov sa pozornosť venovala organofosfátom: ako prvý sa vyrábal Fosfotion (malation) od r. 1958, následne Intration, Arafosfotion a ďalšie. Vývoj smeroval k derivátom menej toxickým pre človeka, a tak sa r. 1967 zahájila produkcia Metationu (fenitrotion, pôvodne zavedený r. 1959 firmami Sumitomo a Bayer; jeho výroba v Dimitrovke si však vyžiadal rozsiahly vlastný výskum). Výroba Metationu (v mohutnej hale blízko dnešnej brány od Vajnorskej ulice, kde vyrástol celý komplex agrochemických výrobní) bežala až do roku 1988, v tom čase už bola v havarijnom stave, a patrila

Obr. 10: Balenie herbicídu Zeazin na export do sovietskeho Ruska (archív, 70-te roky)

k najrizikovejším pracoviskám závodu. K plánovanému zavedeniu modernejšieho, nízkotoxického organofosfátu pirimifos-metylu (Actellic firmy ICI, dnes Syngenta) už nedošlo.

Značná pozornosť sa v Dimitrovke venovala fungicídom, najmä ditiokarbamátového typu (keďže sírouhlík potrebný k ich výrobe bol v továrni k dispozícii.) Zvlášť sa osvedčil Novozir (mancozeb, tj. podvojná zlúčenina etylénbisditiokarbamátu mangánatého a hydroxidu zinočnatého); jeho výroba sa neskôr preniesla do Dusla Šaľa.

V oblasti herbicídov sa do výroby zaviedla kyselina 2-metyl-4-chlórfenoxyoctová (MCPA) a prípravky na jej báze (od 1955), napr. Aminex; neskôr pribudli deriváty 1,3,5-triazínu, najmä Zeazin (atrazin), a od r. 1969 pyrazolový derivát Burex (chloridazon). Z mnohých výskumníkov a vývojárov, ktorí sa zaslúžili o zavedenie týchto (a ďalších) agrochemických výrob, spomeňme bez nároku na úplnosť aspoň zopár mien: Š. Truchlík, S. Gahér, A. Staňová, J. Drábek (organofosfáty), Z. Müller, J. Synak, J. Hrnčiar, P. Rapoš

(herbicídy) a mnohí ďalší. Faktom zostáva, že po r. 1989 nastal prudký úpadok agrochemických výrob; ako posledná bola po r. 2000 odstavená výroba herbicídu Burex. Keďže paralelne zanikli aj výroby v Dusle, všetky agrochemikálie pre naše poľnohospodárstvo sa v súčasnosti musia dovážať – vrátane takých, ktoré sa u nás predtým vyrábali. V časoch trhovej ekonomiky na tom vlastne nezáleží; čo to však vypovedá o slovenskej chémii?

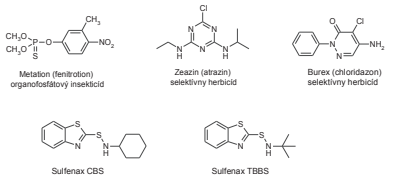


Schéma 1: niektoré významné produkty ochrany rastlín (hore) a gumárenskej chémie (dolu) vyrábané v Dimitrovke.

Výroba gumárenských chemikálií a prísad do plastov sa začala budovať r. 1948 v areáli 5. cechu (na protiľahlej strane dnešnej Odborárskej ulice), kde už fungovala prevádzka sírouhlíka. Sírouhlík bol kľúčovou surovinou pre urýchľovače vulkanizácie. Prvý z nich, Kaptax (2-merkaptobenztiazol) sa vyrábal za vysokého tlaku a teplôt až do 300°C reakciou anilínu so sírouhlíkom a sírou; odpadajúci sírovodík sa následne oxidoval na síru v Clausových peciach. Tento náročný proces sa dodnes realizuje na kontinuálnej linke v novej prevádzke Sulfenaxu. Oxidatívnou kondenzáciou Kaptaxu s cyklohexylamínom účinkom chlórnanu sodného sa vyrába Sulfenax CBS, dlhé roky a dodnes najúspešnejší vývozný artikel celej fabriky. Patrí medzi urýchľovače vulkanizácie s tzv. spracovateľskou bezpečnosťou, čo značí, že po zmiešaní kaučukovej masy s prísadami existuje istá indukčná perióda, po ktorej urýchľovač naštartuje vulkanizačný proces; toto je dôležité najmä pri výrobe automobilových pneumatík. Vzhľadom na úspech Sulfenaxu CBS (a jeho analógu TBBS) sa na sklonku socializmu začala budovať veľkokapacitná výrobňa (10 kt/rok) vo východnej časti továrne; bola sprevádzkovaná r. 1992 - 1993, a dnes je poslednou a jedinou fungujúcou výrobou v areáli Istrochemu (celý 5. cech bol po r. 1989 zbúraný). Technológiu Sulfenaxu vypracoval opäť VUCHT (v 50-tych rokoch H. Bömches, A. Cibáková, J. Mašek a i.; vývoj súčasnej výrobnej jednotky riešili S. Kačáni, J. Holčík, J. Kozma a ďalší). Z dielne VUCHT-u vyšli aj ďalšie výroby na 5. cechu: antioxidanty (napr. 2-merkaptobenzimidazol, substituované fenoly a ich fosfitové estery), plastifikačné a stabilizačné prísady plastov a i.

Debaklom skončilo zavedenie dôležitého Antioxidantu CD ((4-N-izopropylamino)difenylamín) do výroby r. 1968; po vážnych technických problémoch pri nábehu sa nová prevádzka odstavila a neskôr demontovala.

VUCHT, okrem detašovaných pracovísk lokalizovaný na území Dimitrovky/Istrochemu, stál za vývojom agrochemických a gumárenských výrob aj v ďalších závodoch republiky. Vzhľadom na význam spomínaného Antioxidantu CD sa neskôr technológia riešila odznova (J. Mašek, A. Řežábek, P. Doležel, Prof. J. Pašek a mnohí ďalší). Napokon, r. 1985 mohla byť v Dusle Šaľa uvedená do prevádzky veľkokapacitná výrobňa tohto produktu, čo patrilo k najväčším úspechom v dejinách ústavu. Dnes Duslo vyrába tento antioxidant pod názvom Dusantox IPPD. Ďalším produktom Dusla z kuchyne VUCHT-u je inhibítor navulkanizácie Duslin (N-(cyklohexyltio)ftalimid).

Obr. 11: Nová budova VUCHT-u (vyznačená šípkou) na zábere Istrochemu z výškovej budovy Lakeside Park. V popredí lesný porast maskujúci prevádzku trhavín.

Obr. 12: Celkový pohľad na súčasnú prevádzku gumárenských chemikálií (Sulfenax).

Inou oblasťou, kde sa výskum vo VUCHT-e priblížil svetovej špičke v odbore, bola problematika svetelných stabilizátorov pre plasty. Stabilizátorom na báze stericky bránených amínov (tzv. HALS – hindered amine light stabilizers) sa venovala skupina M. Karvaša v čase, keď boli tieto látky vo svete známe skôr akademicky. Podarilo sa vyvinúť technológiu (M. Karvaš, J. Durmis, A. Balogh a ďalší) na výrobu derivátu Dastib 845 (HALS na báze triacetónamínu, t. j. 2,2,6,6-tetrametylpiperidín-4-ónu), ktorá mala byť realizovaná v Chemku Strážske. Napokon sa postavila len overovacia jednotka (nábeh r. 1991); táto však vyrába komerčný produkt dodnes, a patrí v bývalom Chemku medzi najziskovejšie.

Niekedy však boli aj sľubné projekty rozhodnutím nadriadených orgánov z nejasných dôvodov zastavené. Roku 1990 sa napríklad v pokročilom štádiu zrušil výskum a vývoj propikonazolu (úspešný fungicíd firmy Ciba-Geigy, ktorému uplynula patentová ochrana z roku 1978 od firmy Janssen). Či v pozadí takýchto rozhodnutí mohla byť korupcia (pôvodní výrobcovia sa cítili ohrození lacnou konkurenciou), zostalo predmetom špekulácií.

Dnes sa VUCHT venuje v podstate obchodným činnostiam a prenajíma priestory (časť zostávajúcich kapacít sa presunula do Dusla). Ešte koncom socializmu sa začalo so stavbou mohutnej novej budovy ústavu; ironiou osudu bola dokončená r. 1991, keď už výskum takmer nik nepotreboval. Stihol ho rovnaký osud, ako komerčný výskum na Slovensku všeobecne. Pre novodobú oligarchiu domácich veľkopodnikateľov je podstatný rýchly zisk, výskum ich neveľmi zaujíma, pretože prináša efekt až po rokoch a bez záruky. Keď vôbec inovovať, je istejšie niekde kúpiť hotovú technológiu. A pre zahraničie je Slovensko predovšetkým montážnou dielňou, takže investori prinášajú technológie so sebou.

Zmení sa niekedy tento trend? Autor článku odpoveď nepozná. Agrofert (spoločnosť A. Babiša, terajší majiteľ Istrochemu, Dusla i VUCHT-u) sa prednostne orientuje na poľnohospodársku resp. potravinársku výrobu, a v chémii sa sústreďuje na produkciu umelých hnojív (aditíva ako Sulfenax či Antioxidant CD sú z tohto pohľadu len vedľajší bonus). Nič nenasvedčuje tomu, že by Agrofert mal ambíciu vrátiť sa aj k výrobe prostriedkov ochrany rastlín, či dokonca k ich výskumu. Škoda.

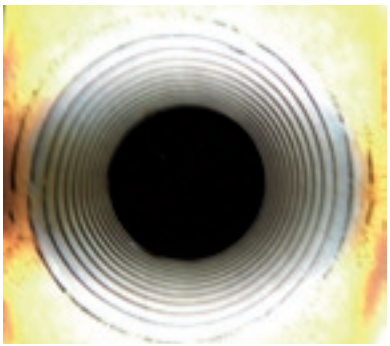
T. Dérer

Periodická precipitácia ako chemická oscilačná reakcia

Vladislav Holba
Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

Úvod

Periodickú precipitáciu, t.j. periodickú tvorbu zrazeniny v gélovom prostredí objavil a po prvý raz opísal R. E. Liesegang ešte koncom 19. storočia [1], preto sa tento fenomén často označuje ako *Liesegangov jav*. V základnom usporiadaní sa experiment uskutočňuje v želatine, umiestenej v Petriho miske, obsahujúcej dichroman draselný s koncentráciou rádovo 0.01 mol dm^{-3}. Po stuhnutí želatiny sa do stredu misky kvapne nasýtený roztok dusičnanu strieborného. Prakticky okamžite vznikne červená zrazenina dichromanu strieborného v tvare disku, ktorý sa postupne zväčšuje. Po istom čase (pri izbovej teplote spravidla niekoľko hodín) sa z okraja disku začnú oddeľovať koncentrické krúžky a zrazenina už nevzniká spojito (Obr. 1). Túto periodickú



Obr.1: Liesegangove krúžky dichromanu strieborného v želatine. Údaje ako v Experimentálnej časti.

precipitáciu možno pozorovať aj pri inom usporiadaní, najčastejšie v zvislých trubiciach. Okrem želatiny možno použiť iný gél, napr. agar a tiež možno použiť aj iné reaktanty, ktoré tvoria málo rozpustnú zrazeninu.

Liesegangov objav krátko po jeho publikovaní zaradil W. Ostwald do svojej učebnice všeobecnej chémie [2]. Pri svojej interpretácii javu zaviedol pojem *supersaturácia*, ktorý sa pre periodicitu ukázal ako kľúčový a prešiel do všetkých ďalších teórií periodickej precipitácie. Podstatou supersaturácie je skutočnosť, že sa na mieste, kde neskôr vznikne zrazenina, zhromaždia reaktanty, pričom ich koncentrácia v homogénnom roztoku vysoko (niekoľko rádov) prekročí hodnotu súčinu rozpustnosti. Zrazenina vzniká až z takéhoto supersaturovaného (presýteného) roztoku. V termínoch modernej ireverzibilnej termodynamiky možno supersaturovaný roztok označiť za sústavu veľmi vzdialenú od rovnováhy. Je zrejmé, že pri danom usporiadaní experimentu, t.j. vysoká koncentrácia dusičnanu strieborného (tzv. vonkajší elektrolyt) v strede poľa a nízka koncentrácia dichromanu draselného (vnútorný elektrolyt) v celom objeme želatiny hrá dôležitú úlohu difúzia, ktorou sa vonkajší elektrolyt posúva do vnútra želatinového roztoku vnútorného elektrolytu. Jednou z najlepšie prepracovaných teórií, ktoré zohľadňujú difúziu a supersaturáciu je Pragerova teória [3]. Okrem difúzie sú však v danom prípade dôležité ďalšie deje, a to reakcia, ktorou vzniká produkt – dichroman strieborný a nukleácia, ktorou sa z koloidných zárodkov produktu tvorí makroskopická zrazenina [4,5]. Vzhľadom na uvedené skutočnosti možno vývoj Liesegangovho obrazca z reaktantov A,B zapísať schémou:

Nukleácia koagulácia
A + B ----------> (AB) ----------> (AB)
koloid makroskopic. zraz

Základy teórií periodickej precipitácie

Teória difúzie ako jedného z hlavných procesov pri vzniku Liesegangovho obrazca sa zakladá na formulácii a riešení diferenciálnych rovníc vyjadrujúcich II. Fickov zákon . Ak označíme symbolom A vonkajší elektrolyt ($AgNO_3$), symbolom B vnútorný elektrolyt ($K_2Cr_2O_7$), symbolmi a,b ich koncentrácie, možno pre II Fickov zákon písať

$$\partial a / \partial t = D_A \partial^2 a / \partial x^2 \quad (1)$$
$$\partial b / \partial t = D_B \partial^2 b / \partial x^2 \quad (2)$$

D_A, D_B sú difúzne koeficienty. V zmysle Ostwaldovej koncepcie supersaturácie sa zavádza veličina *kritická supersaturačná hodnota súčinu koncentrácii elektrolytov*, K_c . Možno odhadnúť, že K_c je o niekoľko rádov väčšia ako rovnovážna hodnota, t.j. súčin koncentrácií K_s. S použitím príslušných okrajových podmienok sa riešením rovníc (1), (2) získajú vzťahy pre závislosť koncentrácie vonkajšieho a vnútorného elektrolytu od času, t a miesta, x

$$a(x,t) = a0 \operatorname{erfc} (x/ \sqrt{(4D_A)}\, t \quad (3)$$
$$b(x,t) = b0 \operatorname{erfc} [(x-x0) / \sqrt{(4D_B)}\, (t-t_0)] \quad (4)$$

a_0 , b_0 sú okrajové podmienky pre koncentráciu vonkajšieho a vnútorného elektrolytu.

Keď na mieste x vznikne Liesegangov krúžok, pozostávajúci zo zárodkov kryštálov dichromanu strieborného, prisúva sa difúziou k týmto zárodkom vnútorný elektrolyt až po vznik makroskopickej zrazeniny. V dôsledku tohto prísunu vzniká v okolí krúžku oblasť *deplécie*. Ďalšia zrazenina môže potom vzniknúť až v určitej vzdialenosti od krúžku, kde je dostatok dichromanu. Dôležitou podmienkou pre vznik obrazca je priepustnosť zrazeniny, aby mohla pokračovať difúzia vonkajšieho elektrolytu.

Okrem difúznej teórie sa v priebehu vývoja sformulovali ďalšie teórie periodickej precipitácie v gélovom prostredí. Svojimi dôsledkami je významná najmä *reakčno-difúzna teória*. Kým difúzna teória nebrala do úvahy rýchlosť s akou prebieha tvorba zrazeniny, v reakčno-difúznej teórii sa táto veličina, úmerná súčinu koncentrácii reaktantov c_A, c_B, zohľadňuje. Namiesto vzťahov *(1, 2)* vychádza reakčno-difúzna teória z rovníc

$$\partial a / \partial t = D_A \partial^2 a / \partial x^2 - k_A c_A c_B \quad (5)$$
$$\partial b / \partial t = D_B \partial^2 b / \partial x^2 - k_B c_A c_B \quad (6)$$

k_A, k_B sú príslušné rýchlostné konštanty. Tieto rovnice dobre vystihujú pomery v homogénnych oscilačných reakciách, sú však príliš veľkým zjednodušením pre periodickú precipitáciu, pri ktorej vznuká nová fáza. Makroskopická zrazenina dichromanu strieborného nevzniká priamo, ale cez niekoľko medzistupňov:

1. Vznik zárodkov (nukleácia), ktoré sú tvorené malým počtom molekúl (rádovo 10)
2. Rast zárodkov až po vznik koloidných častíc zrazeniny
3. Koagulácia koloidu za vzniku makroskopickej zrazeniny.

Vznik koloidu pri periodickej precipitácii možno sledovať experimentálne. Koloidné častice tvoria zónu, ktorá postupuje pred tvoriacimi sa krúžkami zrazeniny *(4, 6)*.

Experimentálna časť

Liesegangove krúžky zrazeniny $Ag_2Cr_2O_7$ sa získali z roztoku 0.01 mol dm^{-3} K_2Cr_2O7 (p.a., Lachema Brno) v 10% želatine (Gelatina animalis čsl.3, Medika Bratislava) zohriateho na 90°C po dobu 30 min. Tento roztok sa prefiltroval a umiestil na sklenenú platňu, pričom utvoril vrstvu asi 2 mm hrubú. Postupným chladnutím roztok stuhol pri izbovej teplote, potom sa ochladil na 5° C. Reakcia sa naštartovala pipetovaním 0.1 mL koncentrovaného roztoku $AgNO^3$ (p.a. Lachema Brno) do stredu platne. Platňa v uzatvorenej sklenenej nádobe sa potom umiestila do chladničky na 24 h pri 5°C. Prekážka pre postupujúci dusičnan strieborný a tým aj pre vznikajúcu zrazeninu dischromanu strieborného sa utvorila vybratím želatiny s vnútorným elektrolytom, ako je zrejmé z *Obr. 2,3*.

Výsledky a diskusia

Vidíme, že periodický vznik zrazeniny – periodická precipitácia spĺňa tri základné požiadavky kladené na oscilačné reakcie [7]:

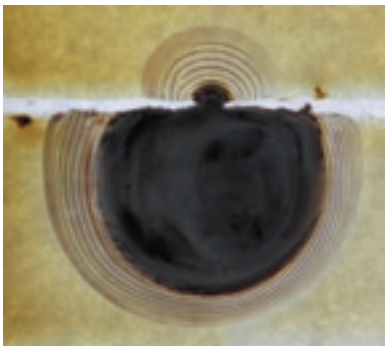
- Systém musí byť vzdialený od rovnováhy

- Reakcia musí mať aspoň jeden autokatalytický stupeň
- Systém musí byť schopný existovať v dvoch stacionárnych stavoch (bistabilita)

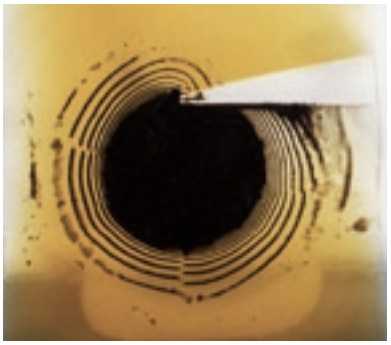
Požiadavku vzdialenosti od rovnováhy spĺňa supersaturácia, autokatalytickým stupňom je rast kryštálov, ktorý je vždy autokatalytický, bistabilitu zaručuje existencia kryštalickej zrazeniny a homogénneho roztoku reaktantov. Oscilačný charakter periodickej precipitácie podčiarkuje skutočnosť, že pri vzniku Liesegangovho obrazca sa uplatňuje Huygensov – Fresnelov princíp charakteristický pre vlnenie, t.j. difrakcia a interferencia. Pri vhodnom usporiadaní experimentu môžeme pozorovať difrakciu *(Obr.2,3)*. Prekážkou v šírení sa krúžkov je prázdne miesto na platni, získané odstránením želatiny obsahujúcej vnútorný elektrolyt. Z *Obr.2* je zrejmé, že keď sa pri raste Liesegangovho obrazca dostane vonkajší elektrolyt $AgNO_3$) do oblasti „štrbiny“, prejaví sa táto ako stred nového vlnenia. Podobný jav možno pozorovať na *Obr.3*, kde sa postupujúce krúžky nešíria za prekážkou priamočiaro, ale ohýbajú sa za ňu. Podobné javy sú dobre známe z oblasti šírenia mechanických vĺn, ako sú napríklad kruhy na vodnej hladine. Pozorované javy svedčia v prospech zaradenia periodickej precipitácie medzi oscilačné reakcie, pre ktoré platia základné zákonitosti vlnenia.

Literatúra

[1] R.E. Liesegang, Phot. Archiv 21 (1896) 221.
[2] W. Ostwald , Lehrbuch der allgemeiner Chemie, Engelman, Leipzig 1897.
[3] S. Prager, J. Chem. Phys. 25 (1956) 279.
[4] S. Kai, S. C. Mueller, J. Ross, J. Chem. Phys. 76 (1982) 1392.
[5] M. E. LeVan, J. Ross, J. Phys. Chem. 91 (1987) 6300.
[6] D. Lexa, V. Holba, Colloid Polym. Sci. 271 (1993) 884.
[7] P. W. Atkins, Physical Chemistry. Oxford University Press (1987) 726.



Obr.2: Prechod Liesegangových krúžkov cez štrbinu. Ostatné údaje ako v Experimentálnej časti.



Obr.3: Prechod Liesegangových krúžkov v okolí prekážky. Ostatné údaje ako v Experimentálnej časti.

Potenciál medzi imobilnou a difúznou vrstvou - elektrokinetický alebo zeta potenciál

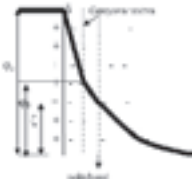
E. Jáné, F. Uherek, D. Velič
Medzinárodné Leaseorvé centrum

Zakúpením a inštaláciou zeta potenciometra (Anton Paar, surpass) sa vytvorilo pracovisko na pre sledovanie elektrokinetického potenciálu povrchov a vlákien. Dôvodom merania zeta potenciálu je zistenie schopnosti daného materiálu sorbovať ďalšie komponenty. Príkladom môže schopnosť sorbovať látky zlepšujúce vlastnosti organických a anorganických vlákien. Tiež umožnuje meranie vlastnosti biologických membrán a podobne. Na zariadení možno sledovať vplyv pH a vplyv koncentrácie pridaných aniónov a katiónov na zeta potenciál rôznych povrchov a vlákien.

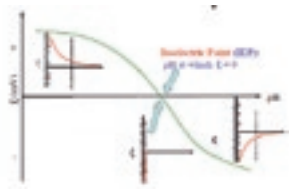
- Zariadenie bolo inštalované 2. februára 2011. Boli vykonané štandardné merania bavlnenej tkaniny a sklených vlákien
- Na zariadení prebiehala výučba v rámci pokročilého cvičenia z fyzikálnej chémie pre študentov 1. ročníka Mgr. štúdia Prírodovedeckej fakulte UK
- Zariadenie bolo použité na meranie elektrokinetického potenciálu sklených vlákien a zisťoval sa vplyv pH na potenciál

Rozsah merania
Prietokovy potencial ± 2000mV
Odpor cely 5..20 MΩ
Tlakovy spad ±1000 mbar
Vodivost $5x10^{-3}$...$2x10^{4}$ mS/m
Meranie pH 0..14
Prietok 0...500 ml/min

Pevné látky vykazujú v kontakte s kvapalinou distribúciu náboja (elektrickú dvojvrstvu). Elektrická dvojvrstva sa najčastejšie popisuje Sternovým modelom. Na povrchu pevnej látky sú naadsorbované ióny (imobilná vrstva), ktorú môžeme aproximovať ako kondenzátor. Elektrický potenciál klesá lineárne. Vo väčšej vzdialenosti sa nachádza difúzna (mobilná vrstva). Rozdelenie náboja sa dá popísať exponenciálnym poklesom. Potenciál zodpovedajúci rozhraniu medzi imobilnou a difúznou vrstvou sa nazýva elektrokinetický alebo zeta potenciál.



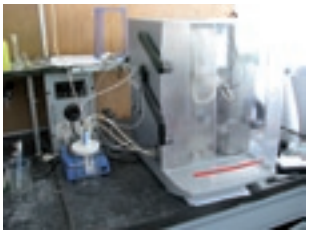
Obr. 1 Definícia Zeta potenciálu.



Obr. 2 Definícia izoelektrického bodu

Vplyv pH na zeta potencia sklenenej dosky

Obr. 3 Meranie povrchu skla



Obr. 4 Zariadnie Anton Paar, Surpass

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE“ a „NanoNet2“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

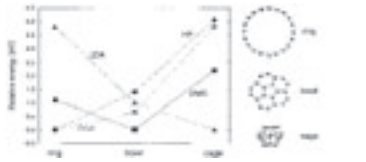
Elektrónová štruktúra: populárne versus presné metódy

Lucia Horváthová, Matúš Dubecký, Ivan Štich
Center for Computational Materials Science, Fyzikálny ústav SAV, Bratislava, Slovensko

Jedným z cieľov vedeckého poznania je modelovanie vlastností kondenzovaných systémov na atomárnej/molekulárnej škále z prvých princípov, t.j. len zo znalosti druhu atómov a vonkajších parametrov, ako teplota, tlak, atp. Pomerne rýchle sa ukázalo, že takúto informáciu je obvykle možné získať len pomocou metód, ktoré berú explicitne do úvahy nielen atómy ale aj elektróny. Ideálne je preto potrebná metóda na modelovanie elektrónovej štruktúry, ktorá je 1) dostatočne presná, pričom sa obvykle myslí „chemická" presnosť (1 kcal/mol, 1 mHa, 0.04 eV); 2) je numericky efektívna, čím sa obvykle myslí škálovanie s veľkosťou systému nie horšie ako $O(N^3)$ a dobrá škálovateľnosť s počtom výpočtových procesorov, resp. jadier; 3) je málo intenzívna na ľudské zdroje, t.j. celý výpočet prebehne automaticky, stlačením klávesy na klávesnici počítača. Takéto metódy zatiaľ síce neexistujú, vznikli však metódy, ktoré sa k tomuto ideálu aspoň približujú.

Príkladom metódy, u ktorej sa predpokladal takýto potenciál je jednočasticová metóda teórie funkcionálu elektrónovej hustoty alebo Density Functional Theory (DFT) [1], za ktorú bola Walterovi Kohnovi a Johnovi Poplovi v roku 1998 udelená Nobelova cena za chémiu [2]. DFT mapuje systém interagujúcich elektrónov na efektívny systém neinteragujúcich elektrónov, pričom všetky kvantovo-mechanické efekty, ako antisymetria vlnovej funkcie, efekty elekrónovej korelácie sú skoncentrované do jedného členu, do tzv. výmenno-korelačnej energie, ktorá je funkcionálom elektrónovej hustoty, ktorého presná forma však nie je známa. Najjednoduchšie priblíženie lokálnej hustoty (local density approximation, LDA), modeluje tieto efekty v priestore lokálne ako systém homogénneho elektrónového plynu, $E_{xc}^{LDA}=E_{xc}^{LDA}[n]$. Ďalším krokom v „rebríku" priblížení k exaktnej výmenno-korelačnej diere je priblíženie GGA (Generalized Gradient Approximation), $E_{xc}^{GGA}=E_{xc}^{GGA}[n,/\nabla n/]$, ktoré v prvom ráde gradientného rozvoja berie do úvahy aj nehomogenity typické napr. pre atómy, molekuly, atp. Krokom iným smerom na rebríku priblížení sú tzv. meta-funkcionály, $E_{xc}^{meta}=E_{xc}^{meta}[n,/\nabla n/,\tau]$, $\tau\Sigma=\Sigma_i^{occ}\ ½/\nabla\Psi_i/^2$, ktoré berú do úvahy aj hustotu kinetickej energie. Metódy DFT spĺňajú podmienku 2) a dnes sú už blízko aj splnenia podmienky 3). Dlho, najmä po zavedení priblíženia GGA, sa verilo, že postupným vylepšovaním po rebríku priblížení bude možné splniť aj podmienku 1), t.j. dosiahnutie chemickej presnosti. Túto vieru bezpochyby odrážalo aj udelenie Nobelovej ceny za chémiu za sformulovanie techník DFT.

Žiaľ, paralelne s úspechmi prišli aj prvé precitnutia. Napr. už v r. 1995 Grossman, Mitas a Raghavachari [3] spočítali energie troch konformácií 20 atómov uhlíka, C^{20}, teda zdanlivo pomerne jednoduchého systému a získali výsledok ilustrovaný na Obr. 1. V skratke, LDA favorizuje kompaktnú štruktúru „klietky" (cage), GGA priblíženie dáva najnižšie v energii otvorenú štruktúru „retiazky" (ring), podobne ako metóda Hartree-Focka, teda metóda, ktorá správne popisuje antisymetriu vlnovej funkcie, avšak neuvažuje žiadnu koreláciu elektrónov. Pozoruhodná je energetická škála na ktorej sa prejavujú rozdiely, ≈ 4 eV, t.j. škála približne stonásobne väčšia ako požadovaná chemická presnosť. Prepočítanie týchto štruktúr takmer exaktnou metódou kvantového Monte-Carla (Quantum Monte-Carlo, QMC) [1] ukázalo, že štruktúra s najnižšou v energiou je štruktúra „misky" (bowl), ktorá je kompromisom medzi kompaktnosťou klietky a otvorenosťou retiazky.



Obr. 1. Relatívne energie troch štruktúr C^{20} spočítané DFT metódami v priblížení LDA a GGA a metódou HF a porovnanie s energiami spočítanými kvázi exaktnou metódou QMC. Uvažované štruktúry sú ukázané v pravom paneli. Adaptované z Ref. [3].

Mnohočasticová metóda QMC [1] je ďalším kandidátom na modelovanie elektrónovej štruktúry vo vyššie uvedenom zmysle. QMC spĺňa podmienky presnosti a numerickej efektívnosti a škálovateľnosti (podmienky 1) a 2)), ale zatiaľ nespĺňa podmienku 3) minimalizácie „ľudských" zdrojov. V skratke, základom projekčných QMC metód je pôsobenie projekčného operátora $exp[-\tau H]$, ktorým sa odprojektuje vlnová funkcia základného stavu z ľubovoľnej počiatočnej funkcie Ψ_{init}:

$$\Phi_{GS} = \lim_{\tau\to\infty} \exp\left[-\tau\left(\hat{H} - E_T\right)\right]\Psi_{init} \qquad (1)$$

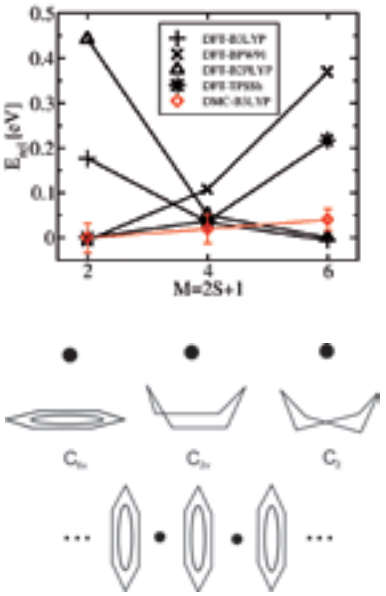
kde $\hat{H}$ je Hamiltonián systému a ET je vhodne zvolený posun energie. Rovnica (1) sa rieši stochastickými metódami [1]. V skutočnosti QMC nie je jedna metóda ale súbor metód, kde rovnica (1) je len posledným krokom, ktorého výsledkom sú finálne energie [1].

Za posledných dvadsať rokov nastal výrazný pokrok vo vývoji DFT výmenno-korelačných funkcionálov, ktoré boli nezriedka vyvíjané špecificky pre jednotlivé triedy materiálov. Ako príklad spomenieme tzv. hybridné funkcionály, ktoré miešajú exaktnú (HF) výmennú energiu (a odpovedajúci potenciál) s lokálnou/semilokálnou DFT výmenou energiou:

$$E_{xc}^{hyb} = (1- a_x)\, E_x^{DFT} + a_x\, E_x^{HF} + E_c^{DFT} \qquad (2)$$

Veľmi známym predstaviteľom tejto skupiny je tzv. B3LYP hybridný funkcionál. „Vypínanie" nekorektnej lokálnej/semilokálnej DFT výmeny (∞ $n^{4/3}$) môže výrazne zlepšiť výsledky v prípade lokalizovanej elektrónovej hustoty, ako je tomu napr. v izolantoch. Opačnou stranou mince je skutočnosť, že v súčasnosti existuje viac ako 300

rôznych výmenno-korelačných funkcionálov z ktorých si môžeme vybrať. Táto situácia môže navodzovať zdanie, že ak netrváme na ab-initio princípe modelovania elektrónovej štruktúry, s určitou dávkou expertízy je vždy možné nájsť alebo dokonca predpovedať výmenno-korelačný potenciál pre každú triedu materiálov. Na príklade systému, kde žiadna zo základných tried výmenno-korelačných funkcionálov nedáva korektný výsledok ukážeme, že tomu tak nie je.



Obr. 2. Relatívne energie VBz polo-sendviča pre rôzne spinové multiplicity v DFT výpočtoch (B3LYP, BPW-91, TPSSh, B2PLYP) a v ultra-presnej QMC metóde [4]. Pravý panel ukazuje sendvič (dolný panel) a polosendvič (horný panel) VBz s možnými Jahn-Tellerovými deformáciami.

Príkladom, kde ani dvadsať rokov vývoja DFT techník neviedlo k požadovanej presnosti sú napr. komplexy atómov *3d* prechodových kovov s molekulami benzénu (Bz). Tieto komplexy patria medzi k najdôležitejším triedam organometaliky s π väzbami. Ako príklad ukážeme výsledky pre systém vanád-benzénu (VBz) [4]. VBz tvorí sendvičové štruktúry typu V_nB_{2n+1}, Obr. 2, so základným stavebným motívom polosendviča VBz. Sendvičové štruktúry sú obzvlášť zaujímavé, nakoľko môžu vykazovať fero/antiferomagnetické interakcie pre ktoré sú energie rádu chemickej presnosti mimoriadne dôležité. Medzi ich najdôležitejšie vlastnosti a súčasne najneobvyklejšie aplikácie patrí ich použitie ako spinové ventily vykazujúce kovové vlastnosti pre elektróny s majoritným spinom a polovodičovú energetickú medzeru pre minoritné spiny.

Otázka, na ktorú sa snažíme odpovedať je, čo sa stane s vysoko spinovým stavom atómu vanádu (stav ^4F $(3d^3 4s^2)$ ak ho ukotvíme chemickou väzbou na molekulu benzénu C_6H_6. Vznikne štruktúra VBz s vysokým spinom alebo sa naopak spin atómu vanádu neutralizuje a vznikne nízko spinová štruktúra VBz? V Obr. 2 sú ukázané energie polosendviča VBz pre rôzne spinové multiplicity spočítané DFT a QMC metódami. V DFT metódach sme použili všetky významné triedy výmenno-korelačných funkcionálov, včítane tzv. „moderných“: GGA (BPW-91), hybridný (B3LYP), meta-hybridný (TPSSh) a double-hybridný (B2PLYP, hybridný so zahrnutím korelácie poruchovými metódami na úrovni MP2). Dva výmenno-korelačné funkcionály, BPW-91 a TPSSh, favorizujú nízku multiplicitu M=2 a dva, B3LYP a B2PLYP, favorizujú vysokú multiplicitu M=6. Explicitne korelovaná metóda QMC pritom dáva, v rámci štatistickej neurčitosti, kvázi degenerované energie pre všetky 3 multiplicity. Aj u tohto systému teda vzniká situácia podobná ako u konformérov C_{20}, Obr. 2. Energetická škála, na ktorej pozorujeme tieto rozdiely je síce menšia, ≈0.5 eV, ale stále o rád väčšia ako požadovaná chemická presnosť. Vzhľadom na kvázi degenerované energie ani metódy QMC nevedia spinovú multiplicitu určiť priamo výpočtom celkovej energie, vieme však s určitosťou povedať, že rozdiely energií medzi multiplicitami sú veľmi malé, < 0.1 eV. Inými slovami, metódy QMC redukujú neurčitosť energií oproti metódam DFT o faktor 5! Energetickú stabilitu jednotlivých multiplicít nie je síce možné priamo merať, ale technikami QMC je možné zrátať aj ďalšie veličiny, ktoré sú merateľné priamo, napr. ionizačné energie, alebo nepriamo, napr. disociačné energie [4]. Ďalšou zaujímavou veličinou, ktorú vieme odhadnúť metódami QMC je spinovo závislá energetická medzera. Táto sa u jednočasticových metód obvykle aproximuje ako HOMO-LUMO medzera. U mnohočasticových metód ju môžeme aproximovať rozdielom energií $E_g^{\uparrow\downarrow} = (EN_{+1}^{\uparrow\downarrow} - E_N) - (E_N - E_{N-1}^{\uparrow,\downarrow})$. Na úrovni DMC dostávame $E_g\uparrow$ = 4.90 eV a $E_g\downarrow$ = 10.04 eV, zhruba dvojnásobok HOMO-LUMO medzier $E_g\uparrow$ = 2.34 eV a $E_g\downarrow$= 6.28 eV spočítanými DFT metódami. Očakáva sa, že tieto rozdiely sa budú zväčšovať s dĺžkou sendviča.

Na záver, toto zamyslenie sa nad štandardnými metódami na výpočet elektrónovej štruktúry, ktorých typickým predstaviteľom sú bezo sporu metódy DFT a ich porovnanie s kvázi exaktnými metódami QMC ukazuje, že presné modelovanie výmenno-korelačnej energie, E_{xc}, v DFT technikách zostáva stále skôr prianím ako skutočnosťou. Existujú však už určité triedy materiálov, kde sa podarilo nájsť uspokojivý až vynikajúci popis s presnosťou blízkou chemickej. U tých materiálov, kde tomu tak nie je, je vždy možné spraviť presný výpočet na menšom, napr. klastrovom systéme, presnou metódou, a tak získať parametre výmennej a korelačnej diery, ktoré na rozdiel od celkovej energie konvergujú rýchlo s veľkosťou systému. Tieto presné výpočty je možné parametrizovať niektorým zo známych výmenno-korelačných funkcionálov a následne použiť v inak štandardných DFT výpočtoch. Predpokladáme, že takéto spojenie približných DFT a presných QMC metód je cesta, ktorou sa bude presné modelovanie elektrónovej štruktúry uberať.

Poďakovanie

Tento výskumný projekt bol podporený zo zdrojov ERDF OP R&D, projekt CE meta-QUTE ITMS 26240120022.

Literatúra

[1] I. Štich, Acta Phys. Slov. **57**, 1 (2007).
[2] http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/
[3] J. C. Grossman, L. Mitas, K. Raghavachari, Phys. Rev. Lett. **75**, 3870 (1995).
[4] L. Horváthová, M. Dubecký, Ľ. Mitas, I. Štich, v tlači vo Phys. Rev. Lett. (júl 2012).

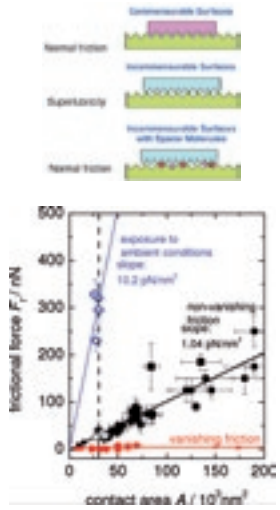
Nanotribológia - chémia na pohybujúcich sa rozhraniach

Ján Brndiar, Robert Turanský, Ivan Štich
Center for Computational Materials Science, Fyzikálny ústav SAV, Bratislava, Slovensko

Trenie je jedným z najbežnejších fyzikálnych javov, s ktorými sa stretávame v každodennom živote. Na makroskopickej škále je trenie pomerne dobre pochopené; popisuje ho Amontonov zákon, ktorý hovorí, že trecia sila je priamo úmerná tlakovej sile . Koeficient úmernosti , tzv. koeficient trenia, je materiálová konštanta charakterizujúca rozhranie, na ktorom trenie prebieha. Z toho bezprostredne vyplýva, že na makroskopickej škále trecia sila nezávisí od kontaktnej plochy rozhrania. Amontonov zákon tiež implicitne hovorí, že trecia sila nezávisí ani od rýchlosti, ktorými sa objekty v kontakte pohybujú. Situácia sa úplne mení na nanoškále, kde je naše poznanie základných procesov stále neúplné. Ukázalo sa napríklad, že trecia sila závisí od kontaktnej plochy, a tiež od teploty rozhrania a rýchlosti pohybu styčných plôch počas trenia.

Veľmi neobvyklá závislosť trecej sily od kontaktnej ploche bola pozorovaná v nedávnych experimentoch [1, 2], v ktorých sa skúmalo trenie pri posúvaní nanočastíc antimónu hrotom statického AFM mikroskopu po povrchu grafitu (HOPG-Highly Ordered Pyrolytic Graphite) v UHV podmienkach. Spravili sa dva experimenty. V prvom sa častice pripravili v UHV podmienkach a trenie sa meralo počas laterálnej manipulácie. V druhom experimente sa častice vystavili na niekoľko dní pôsobeniu vonkajšej atmosféry a častice sa opäť posúvali v UHV podmienkach. Závislosť trecej sily od kontaktnej plochy, Obr. 1, vykazuje dve duality trenia jasne vymedzené tromi oddelenými frikčnými vetvami. Prvá dualita, pozorovaná u antimónu pripraveného za UHV podmienok, vykazuje buď zanedbateľné trenie (vanishing friction branch) alebo trenie škálujúce lineárne s kontaktnou plochou (nonvanishing friction branch). U nanočastíc antimónu vystavených vonkajším podmienkam tieto opäť vykazujú dualitu vo frikčnom správaní za UHV podmienok: časť nanočastíc vykazuje lineárne správanie rovnako ako u častíc pripravených za UHV podmienok (nonvanishing friction branch) a koexistuje spolu s nanočasticami vykazujúcimi trenie zhruba o rád väčšie (after exposure to ambient conditions branch).

Jasne separované frikčné vetvy, Obr. 1, dávajú ideálnu možnosť hlbšie porozumieť treniu na nanoškále. Existujúce teoretické modely [3] popisujú najmä základné princípy nanotribológie. Napr. pre nesúmerateľné rozhrania predpovedajú superlubricitu, pozri Obr. 1 pre jednoduché vysvetlenie. Nakoľko väčšina rozhraní je nesúmerateľná, ich pohyb by mal preto prebiehať bez trenia, čo sa nepozoruje. Túto diskrepanciu teórie vysvetľujú prítomnosťou nečistôt, ako voda, uhľovodíky, atď. ktorých rezíduá sú prítomné aj za UHV podmienok. Tieto nečistoty „uzamknú“ rozhranie, pozri Obr. 1 pre jednoduchú ilustráciu. Teórie predpovedajú, že prítomnosť nečistôt povedie k lineárnej závislosti trenia od kontaktnej plochy



Obr. 1. Ľavý panel: Experimentálne výsledky závislosti trecej sily od kontaktnej plochy pre systém nanočastíc antimónu na povrchu HOPG [1, 2]. Pravý panel: Schematické vysvetlenie teoretických modelov [2, 3].

[3]. Tieto koncepty je možné použiť aj na systém nanočastíc antimónu na HOPG. Rozdiel mriežkových konštánt antimónu a HOPG je asi 4, z čoho je možné predpokladať, že superlubricita je zodpovedná za existenciu vetvy so zanedbateľným trením a naopak, zostatkové nečistoty poskytujú vysvetlenie pre vetvu s nenulovým trením. Teórie predpovedajú, že nečistoty musia byť pohyblivé. Ak by totiž boli rigidné, ich prítomnosť by opäť viedla k nesúmerateľnému rozhraniu a superlubricite [2, 3]. Napriek všetkým týmto teóriám je prekvapením, že sa experimentálne pozorujú tri jasne separované frikčné vetvy. Okrem toho, tieto teórie nedávajú žiadne vysvetlenie druhej pozorovanej duality pre častice vystavené vonkajšiemu prostrediu, rovnako ako neobjasňujú mobilitu molekúl v rozhraniach, atď. Veľké koncentrácie nečistôt totiž nemusia byť kompatibilné s UHV podmienkami, za ktorých sa frikčné experimenty prevádzajú alebo so samotnou existenciou duality. Modely založené na existencií vrstvy oxidu na rozhraní Sb-HOPG by museli vysvetliť, prečo nesúmerateľné rozhranie oxidu nevedie k superlubricite. Preto, existencia vysokofrikčnej vetvy vyžaduje nový model.

Systém Sb-HOPG sme použili na podrobné teoretické modelovanie všetkých troch frikčných vetiev. Museli sme však prekonať dva problémy. Nesúmerateľné rozhranie Sb-HOPG je potrebné popísať konečným modelom, ktorý by netrpel problémami chybnej koordinácie typickými pre klastrové modely. Za týmto účelom sme skonštruovali periodické aproximanty [4]. Príkladom je hexagonálna 77 HOPG cela na ktorej je cela antimónu rezaná pozdĺž roviny [111], ktorá tvorí 44 hexagonálnu celu, pričom sme mierne zmenili mriežkovú konštantu, aby sme získali periodickú štruktúru. Časti takto skonštruovaného rozhrania sú ukázané na Obr. 2. Takýto model nesúmerateľného rozhrania po-

zostáva typicky rádovo zo stoviek atómov a preto ho nie je možné riešiť použitím korelovaných metód kvantovej chémie. Ako vhodný kompromis z pohľadu numerickej uskutočniteľnosti sa javia metódy teórie hustotového funkcionálu (DFT- Density functional methods) [5]. Metóda DFT však nezahŕňa dlhodosahové nelokálne korelácie, typické pre van der Waalsové (vdW) interakcie, pričom rozhranie Sb-HOPG je rozhranie viazané primárne vdW interakciami. Dôsledkom tohto deficitu DFT teórie je, že napr. vrstvy grafitu (HOPG) interagujúce vdW väzbami nie sú v teórii DFT viazané. vdW interakcie sú v podstate párové interakcie, a preto ich je pomerne jednoducho možné „pridať“ ako korekciu k štandardným DFT povrchom potenciálnej energie (PES) [6]. Tieto tzv. DFT + vdW teórie predstavujú v súčasnosti veľmi aktívne pole výskumu. DFT + vdW teóriu sme požili pri popise nesúmerateľného Sb-HOPG rozhrania, ktoré sme staticky (T = 0 K) posúvali v malých krokoch za súčasnej štrukturálnej relaxácie [4]. Testy ukázali, že, napriek jednoduchosti, sa jedná o pomerne presný model. Napr. pre rozhranie Sb4-HOPG sme našli bariéry 30 meV. Experimentálne zmerané difúzne bariéry sú 40–60 meV. Pre nesúmerateľné Sb-HOPG rozhranie napr. náš model pre nanočasticu s kontaktnou plochou 30×103 nm² dáva silu trenia ≈5.8 nN, v dobrej zhode s experimentálnou hodnotou ≈3 nN (Obr. 1).

Podrobnejšie si ukážeme výsledky pre vetvu „normálneho“ trenia. Skúmali sme rôzne kontaktné molekuly: O2, propán, H2O, Sb4, atď. Výsledky pre jednu molekulu vody v nesúmerateľnom Sb-HOPG rozhraní sú na Obr. 2. Vidíme, že jedna molekula vody generuje bariéry 100 meV (zelená krivka). Molekula sa pri posune rozhrania hýbe spolu s nanočasticou antimónu, pričom atómy vodíka rotujú okolo kyslíka (čierna krivka). Z teórie je zrejmé, že táto rotácia je nutnou podmienkou na to, aby sa bariéry pri stredovaní síl cez kontaktnú plochu nevynulovali. Simulácia tiež poskytuje odpoveď na otázku, čo je hnacou silou rotácie molekuly vody v rozhraní. V lokálnych minimách energie voda vytvára dve slabé väzby. Jednu, H-Sb, k nanočastici antimónu a druhú, H-C, k HOPG substrátu (ľavý spodný panel na Obr.2). Tieto slabé väzby sa porušia, keď sa nanočastica antimónu dostane na vrchol bariéry (pravý spodný panel na Obr.2). Narušenie väzieb spôsobuje rotáciu molekuly vody. Keď častica zostupuje smerom do nového lokálneho minima, snaží sa obnoviť porušené väzby, čo dosahuje opäť svojou rotáciou okolo atómu kyslíka. Z výsledkov simulácie môžeme spraviť jednoduchý odhad sily, ktorú na nanočasticu antimónu generuje jedna molekula vody. Zo zmeny energie (100 meV) na dráhe 0.8 Å dostávame

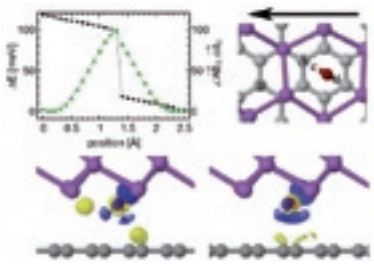
$$F_1 = \frac{1.602 \times 100}{0.8} = 200\ \mathrm{pN}$$

Z nej je možné odhadnúť koncentráciu molekúl vody, za predpokladu, že by trenie spôsoboval len jeden druh nečistôt:

$$\frac{F_f/F_1}{A} \approx 1\ \text{molekula}\ \mathrm{H_2O}/200\mathrm{nm}^2$$

Táto hodnota, ktorá predstavuje minimálnu koncentráciu, je v súlade s očakávaním v podmienkach UHV.

Podobnú analýzu je možné spraviť aj pre iné molekuly a prípadne tiež pre viaceré molekuly, resp. ich kombinácie v rozhraní [4]. Zaujímavé výsledky dávajú najmä simulácie vetvy vysokého trenia (after exposure to ambient condition branch). Jednoduchou úvahou je možné dospieť k záveru, že v tomto prípade sa nemôže jednať o vytvorenie vrstvy oxidu na kontaktnej ploche nanočastice, nakoľko by sa opäť vytvorilo nesúmerateľné rozhranie so zanedbateľným trením. Simulácie ukázali,



Obr. 2. Simulácia molekuly vody v rozhraní Sb-HOPG. Vľavo: PES (zelené trojuholníky) a uhol medzi smermi charakterizujúci pohyb molekuly v rozhraní (čierne body). Šípka v pravom hornom paneli ukazuje smer posunu rozhrania. Dva spodné panely ukazujú indukovaný náboj po vložení molekuly vody do rozhrania pre geometrie, ktoré zodpovedajú minimu energie (vľavo) a maximu energie (vpravo). Žltá farba zobrazuje akumuláciu náboja, modrá farba odtok náboja.

že sa lokálnou oxidáciou na kontaktnej ploche môžu vytárať zhluky typu Sb_4O_6 alebo Sb_4O_3, ktoré nielen vykazujú veľkú korugáciu PES (100 meV), ale súčasne aj mobilitu zamedzujúcu nulovaniu síl pri stredovaní cez plochu nanočastice [4].

V tomto zamyslení sa nad trením na nanoškále sme ukázali, že na trecích plochách dochádza k „chemickým reakciám“ indukovaným mechanickým pohybom, t.j. k mechanochémii. Analýzou experimentálnych výsledkov systému nanočastíc antimónu na grafite sme ukázali, že pre všetky tri separované experimentálne pozorované frikčné vetvy je možné sformulovať teoretický model, ktorý umožňuje ich porozumenie na atomárnej/molekulovej škále. Napriek tomu zostávajú ešte stále viaceré otázky nezodpovedané. Tu je niekoľko stále otvorených otázok, na ktoré hľadáme odpovede. Napr., je počet frikčných vetiev konštantný a rovný trom? Ak tomu tak nie je, ktoré frikčné vetvy sa budú realizovať? Je možné tieto výsledky anticipovať na základe získanej expertízy?

Poďakovanie

Tento výskumný projekt bol podporený zo zdrojov ERDF OP R&D, projekt CE meta-QUTE ITMS 26240120022.

Literatúra

[1] D. Dietzel, C. Ritter, T. Mönninghoff, H. Fuchs, A. Schirmeisen, U. D. Schwarz, Phys. Rev. Lett. **101**, 125505 (2008).

[2] J. Brndiar, R. Turanský, D. Dietzel, A. Schirmeisen, I. Štich, Nanotechnology **22**, 085704 (2011).

[3] A. Schirmeisen and U. D. Schwarz, ChemPhysChem 10, 2373 (2009).

[4] J. Brndiar, R. Turanský, I. Štich, Phys. Rev. **B 84**, 085449 (2011).

[5] I. Štich, Acta Phys. Slov. **57** , 1 (2007).

[6] S. Grimme, J. Comp. Chem. **27**, 1787 (2006).

Spektroskopická charakterizácia zlúčenín polytiofénov metódou korelačného počítania fotónov

Milan Držík a Juraj Chlpík
Medzinárodné laserové centrum Bratislava

Úvod

Polytiofény a tiofénové oligoméry sú organické zlúčeniny, v ktorých dve alebo viacero tiofénových jadier eventuálne substituovaných sú navzájom reťazené. Takéto organické zlúčeniny vykazujú zaujímavé vlastnosti vzhľadom na ich elektrickú vodivosť; oligotiofény možno využiť na transport náboja v molekulovej elektronike, kde tieto organické konjugované polyméry nachádzajú stále viac konkrétnych aplikácií. Atraktivita týchto zlúčenín v posledných rokoch vyplýva z ich fyzikálnych vlastností, ale aj relatívne jednoduchej prípravy. Okrem perspektívnej aplikácie ako svetelných zdrojov (najmä organické LED) sa dnes zvláštna pozornosť venuje potenciálnemu využitiu takýchto materiálov vo funkcii detektorov svetla – fotodiód resp. fotočlánkov. Oligoméry tiofénu sú tiež zlúčeninami s výraznými fluorescenčnými vlastnosťami vhodnými napríklad aj na fluorofórové značkovanie. Charakteristické sú aj svojou chemickou a optickou stabilitou, vysokou absorbanciou vo zvolenej spektrálnej oblasti i vysokou kvantovou účinnosťou. Dôležitou skutočnosťou je, že fotoluminiscenčné vyžarovanie a vlastnosti z hľadiska potrieb optoelektroniky môžu byť modulované zmenou molekulovej štruktúry t.j. zmenou počtu tiofénových jadier a vhodných bočných reťazcov substituentov, ktoré možno relatívne jedoducho realizovať pri príprave organickou syntézou.

Štúdium spektroskopických vlastností

Pri štúdiu procesov fotoexcitácie konjugovaných polymérov, ale aj pri sledovaní procesov dohasínania vybudených stavov cez fotoluminiscenciu, sú oligoméry vďačným materiálom. Hlavnou výhodou je ich dobre definovaná molekulová štruktúra a jednoznačná dĺžka reťazca, ktorá pri optickom meraní umožňuje detailne dávať do vzájomnej súvislosti vzťah medzi štruktúrou a jej optickými (spektrálnymi) vlastnosťami. Keď využijeme oligoméry s rôznym počtom monomérnych skupín, môžeme skúmať efekt zväčšujúcej sa dĺžky konjugovaného reťazca a odhadnúť tak základné vlastnosti aj zložitejšieho polyméru [1,2]. Využitím pokročilých postupov organickej syntézy môžeme vytvoriť reťazce s dĺžkou až 16 tiofénových skupín, na ktorých môže byť sledovaná fotoluminiscenčná odozva.

Obr. 1 Časový korelátor signálov PicoHarp 300 pre časovo rozlíšenú spektroskopiu.

Obr. 2 Rýchly fotodetektor Microphotonics Devices pre korelačné počítanie jednotlivých fotónov

Ďalším dôležitým aspektom pri skúmaní vlastností oligomérov je skutočnosť, že môžu byť študované aj vlastnosti jednotlivých molekúl materiálu. Za týmto účelom sa materiál sleduje v roztoku, kde sú molekuly navzájom izolované. Pokiaľ prechádzame z vlastností takto izolovanej molekuly na makroskopický materiál, optické vlastnosti sa budú meniť, čo je zapríčinené medzimolekulovými interakciami existujúcimi v materiáli ako tuhej látke. Štruktúra takejto látky môže byť určená spoľahlivo napríklad pomocou roentgenovej kryštalografie.

Pri výskume, návrhu a výrobe moderných polovodičových prvkov ako sú citlivé fotodetektory, intenzívne svietiace luminiscenčné diódy (LED), vysokoefektívne laserové diódy, či bipolárne tranzistory na heteroštruktúrach, by sme mali detailnejšie poznať ich materiálové charakteristiky. Jedným z najdôležitejších parametrov je doba života minoritných nosičov v polovodičovom materiáli. Časovo rozlíšené spektrá fotoluminiscencie poskytujú v tomto smere veľmi dôležitú a spoľahlivú informáciu. Časová analýza môže odhaliť informáciu o molekule, ktorá sa nedá vyčítať zo statických spektrálnych závislostí. Hoci časové záznamy dohasínania luminiscencie možno v princípe získať aj priamo pomocou dostatočne rýchlych budiacich laserových zdrojov a fotodetektorov luminiscenčného žiarenia, efektívnejší spôsob ako tieto časové spektrá zaznamenať – aj s ohľadom na často veľmi malú intenzitu fluorescencie – je využitie metódy časovo rozlíšeného korelačného počítania fotónov.

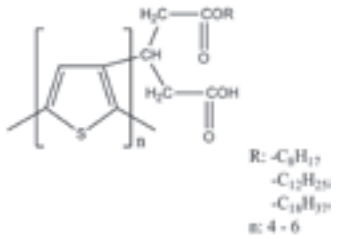
Časovo rozlíšená fotoluminiscencia

Schopnosť detekcie jednotlivého fotónu je limitnou úrovňou dosiahnuteľnou pri meraní optického žiarenia. Časovo korelované počítanie jednotlivých fotónov je technika umožňujúca záznam s extrémne vysokou citlivosťou, presnosťou a rozlišovacou schopnosťou v oblasti pikosekúnd. Metóda je založená na opakovanom (s vysokou frekvenciou rádovo desiatok MHz) zázname jednotlivých fotónov vysielaných fotoluminiscenciou materiálu. Časový referenčný bod každého jednotlivého záznamu korešponduje s excitačným impulzom lasera, ktorý takto predstavuje synchronizačný signál. Za

predpokladu, že pravdepodobnosť registrácie viac než jedného fotónu v cykle je malá, histogram intervalu objavenia sa fotónu reprezentuje aj dosvit v čase. Takýmto spôsobom možno získať s využitím korelačnej analýzy histogram dosvitu fotoluminiscencie. Táto operácia sa uskutočňuje napr. v zariadení elektronického korelátora PicoHarp 300. Je to kompletný systém pre pikosekundové časovo rozlíšené merania (časová rozlišovacia schopnosť je 4 ps). Korelátor je spojený s PC cez vysokorýchlostný port USB 2.0. V spojení s rýchlym detektorom – lavínovou fotodiódou SPAD výrobcu Microphotonics Devices typu MPD – je zabezpečená odozva systému s nábežnou hranou 50 ps.

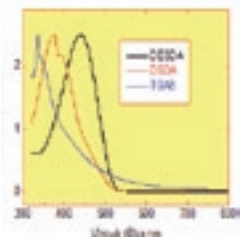
Experiment a výsledky

Pri testovaní možností merania statických i dynamických spektier sme ako zlúčeninu zvolili tri vzorky rôznych substituovaných polytiofénov. Tieto boli pripravené na Ústave chemického a enviromentálneho inžinierstva Fakulty chemickej a potravinárskej chémie STU v Bratislave [3]. Syntetizované polytiofény (Obr. 3) boli rozpustené v roztoku chloroformu. Testovali sme celkom tri druhy vzoriek: oligo (8-alkyl-3-(3-tienyl) glutarovej kyseliny (TGA8), dimetylester sexitiofén dikarboxylovej kyseliny (DESDA) a decil sexitiofén dikarboxylovej kyseliny (DSDA), pričom vzájomné rozdiely boli jednoznačne detegovateľné.



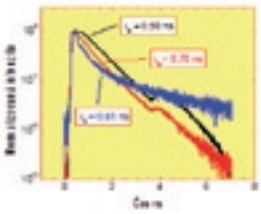
Obr. 3 Chemická štruktúra oligo (8-alkyl-3-(3-tienyl) glutarovej kyseliny)

Obr. 4 prezentujúci statické absorbčné spektrá troch druhov polytiofénov ukazuje, že v závislosti od štruktúry molekúl môžu byť krivky posunuté až do blízkej UV oblasti. Pomerne široký rozsah spektrálnych absorbčných maxím dokumentuje možnosť posunutia spektrálnej oblasti materiálu pomocou vhodnej voľby jeho chemického zloženia.



Obr. 4 Spektroskopické záznamy absorpčných kriviek troch rôznych druhov polytiofénov.

Ďalší Obr. 5 ukazuje záznamy časovo rozlíšených spektier fluorescencie získané metódou korelačného počítania fotónov pre zlúčeniny toho istého zloženia. Z obrázku je evidentná rôzna časová konštanta procesu dohasínania pri fotoluminiscencii vybudenej pikosekundovými impulzami lasera na vlnovej dĺžke λ = 379 nm (časová dĺžka impulzov FWHM = 50÷60 ps).



Obr. 5 Časovo závislé krivky intenzity dohasínania fluorescencie troch vzoriek oligotiofénov v roztoku chloroformu pri izbovej teplote.

Fluorescenčné krivky dohasínania sa ukázali byť blízke exponenciálnemu resp. biexponenciálnemu priebehu pre všetky testované zlúčeniny, čo je najlepšie vidieť pri zobrazení pomocou semilogaritmického grafu. Z vyhodnotených časových konštánt dohasínania je vidieť, že tento exponenciálny parameter dohasínania sa pre rôzne molekulové štruktúry líši, pričom závisí predovšetkým od dĺžky reťazca konkrétneho oligotiofénu. Rovnako ako absorpčné spektrá aj spektrá časovo rozlíšené ukazujú značný posun pri zväčšení reťazca molekuly oligotiofénu smerom k väčším vlnovým dĺžkam resp. zväčšovaniu časovej konštanty dohasínania.

Záver

Ako vyplýva z opisu zariadení Laboratória aplikovanej optiky MLC vybavenie laboratória dovoľuje uskutočňovať náročné experimenty merania fotoluminiscencie organických polovodičov, ako aj polovodičových materiálov pre fotoniku s veľmi krátkou luminiscenčnou odozvou. Vzhľadom k tomu, že už dnes riešené projekty FP 7 vyžadujú informáciu o dynamike fotoluminiscenčných javov podobných materiálov, využitie metodiky časovo korelovaného počítania fotónov sa ukázalo byť veľmi efektívnym prostriedkom a realizovaná metodika bude rozvíjaná i naďalej.

Poďakovanie

Táto publikácia bola vytvorená v rámci realizácie projektu MetaQUTE-Centrum excelentnosti kvantových technológií, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Vyslovujeme tiež poďakovanie G. Číkovi, J. Cirákovi, M. Sokolskému a M. Weisovi za prípravu a poskytnutie vzoriek polytiofénov.

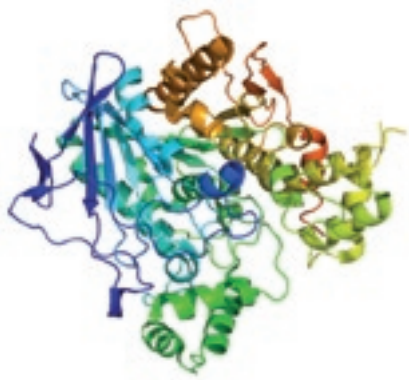
Literatúra

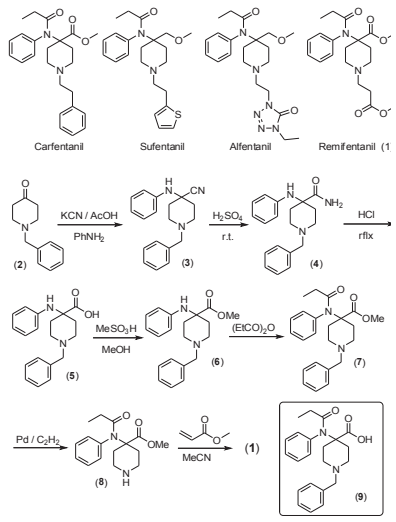
1. D. Grebner, M. Helbig, S. Rentsch: Size-Dependent Properties of Oligothiophenes by Picosecond Time-Resolved Spectroscopy, *J. Phys. Chem.* **99**, 1995
2. A. Yang, M. Kuroda, Y. Shiraishi, T. Kabayashi: Chani-Length Dependent Stationary and Time-Resolved Spectra of α-Oligothiophenes, *J. Phys. Chem.* **102,** 1998
3. G. Čík, D. Végh, P. Zálupský, J. Cirák, P. Tomčík: Electrochemical synthesis of oligomers of the mono n-octyl-ester of 3(3-thienyl) glutaric acid and its properties, *Synthetic Materials* **96**, 1998

Štúdium optimálneho spôsobu syntézy vysoko účinných liečiv

František Mathia, Michaela Halinkovičová, Viktor Milata, Štefan Marchalín
Department of Organic Chemistry, Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic

Remifentanil - metyl 4-{(metoxykarbonyl)-4-[(1-oxopropyl)fenylamino]-1-piperidín}propanoát (**1**) - je syntetické analgetikum ktoré je vo forme soli - hydrochloridu dostupné na trhu pod obchodným názvom Ultiva® (GlaxoSmithKline, Ganval, Belgicko). Patrí do skupiny analgetík charakteristických rýchlym nástupom analgetického účinku a ultrakrátkou až dlhou dobou analgetického pôsobenia, ktoré sa používajú ako ko-analgetiká podávané za účelom bezpečnejšieho manažmentu celkovej anestézie počas chirurgických zákrokov, na manažment bolesti v pooperačných stavoch alebo pri liečbe hyperalgézie (zvýšená citlivosť na bolesť)[1] (Obrázok 1.). Remifentanil sa v ľudskej





krvi metabolizuje nešpecifickými krvnými esterázami na prakticky neaktívny metabolit - karboxylovú kyselinu (9).[2] (Obrázok 2) Polčas metabolizmu v ľudskej krvi sa pohybuje v rozmedzí 10-20 minút.[3] Prvá zmienka o remifentanile, jeho príprave a vlastnostiach pochádza z roku 1990.[4] Syntetická cesta k remifentanilu, budovaná od počiatku na prípravu remifentanilu, využíva ako východiskovú látku komerčne dostupný N-benzylpiperidin-4-ón (**2**)[5]

V prvom kroku sú Streckerovou syntézou zavedené do molekuly N-fenylamino a kyano-funkčné skupiny obe v polohe 4 heterocyklického skeletu. N-Fenylamino skupina acylovaná propionylom sa nachádza aj v štruktúre cieľového remifentanilu. Kyano skupina v molekule (**3**) predstavuje výhodný zdroj karboxylovej funkčnej skupiny. Kiricojević vo svojej práci spomína výrazné urýchlenie Streckerovej reakcie použitím zmesného rozpúšťadla dichlórmetán/kyselina octová, čo vysvetľuje zlepšením rozpustnosti in situ vzniknutého kyanovodíka v tomto rozpúšťadle v porovnaní s čistou kyselinou octovou.[6] Hydrolýza nitrilu (**3**) prebieha v dvoch krokoch cez amid (**4**), najmä z dôvodu tvorby nerozpustnej soli (**4**). H_2SO_4, ktorá nereaguje ďalej. Po uvoľnení voľnej bázy je amid (**4**) následne podrobený hydrolýze s kyselinou chlorovodíkovou. Taktiež je možné amid (**4**) hydrolyzovať za bázických podmienok použitím hydroxidu draselného v propán-1,2-diole a v prítomnosti crown éteru 18-crown-6. Nejeden syntetický chemik by pri pohľade na dvojkrokovú transformáciu nitrilu (**3**) na karboxylovú kyselinu (**5**) navrhol tieto kroky zjednotiť a kyslou hydrolýzou pripraviť karboxylovú kyselinu *„one-pot“* postupom. Navyše vo vhodnom rozpúšťadle by mohlo byť teoreticky možné pripraviť priamo metylester karboxylovej kyseliny, resp. intermediát (**6**). Napriek mnohým pokusom[6] sa však nepodarilo transformovať medziprodukt (**3**) na karboxylovú kyselinu (**5**) alebo metyl ester (**6**) v jednom kroku so synteticky akceptovateľným výťažkom. Silne kyslé podmienky a vysoká reakčná teplota, podobne ako pokusy o bázickú hydrolýzu nitrilovej funkčnej skupiny viedli prevažne k produktu výrazne rýchlejšej retro-Streckerovej reakcie[7] (analógia Bruylantovej dekyanácie amínov 2).

Od roku 1990 bolo vypracovaných viacero viac, či menej efektívnych prístupov k remifentanilu a jeho analógom. Napriek tomu neustáva dopyt po alternatívnych metódach prípravy tohto analgetika a to nielen z dôvodu snahy o efektívnejšiu a ekonomickejšiu prípravu tejto zlúčeniny, ale aj z dôvodov pretrvávajúcej patentovej ochrany najvýhodnejších syntéz. Cieľom aktuálneho výskumu je nájdenie novej syntetickej cesty vedúcej k tomuto liečivu.

[1] Guntz, E., Dumont, H., Roussel, C., Gall, D., Dufrasne, F., Cuvelier, L., Blum, D., Schiffmann, S. N., Sosnowski, M.: *Anesthesiology*, **2005**, 102, 1235-1241.
[2] Feldman, P. L., James, M. K., Brackeen, M. F., Bilotta, J. M., Schuster, S. V., Lahey, A. P., Lutz, M. W., Johnson, M. R., Leighton, H. J.: *J. Med. Chem.*, **1991**, 34, 2202-2208.
[3] Amin, H. M., Sopchak, A. M., Esposito, B. F.: *J. Pharmacol. Exp. Ther.*, **1995**, 274, 34–39.
[4] EP0383579, Glaxo Wellcome Inc.
[5] WO0140184A2, Mallinckrodt Inc.
[6] Kiricojević. V. D., Ivanović, M. D., Mićović, I. V., Djordjević, J. B., Roglić, G. M., Došen-Micović, L. J.: *J. Serb. Chem. Soc.*, **2002**, 67, 793-802.
[7] a) Feldman, P. L., Brackeen, M. F.: J. *Org. Chem.*, **1990**, 55, 4207-4209. b) Marco, J. L., Ingate, S. T., Chinchon, P. M.: *Tetrahedron*, **1999**, 55: 7625-7644.
8 Kudzma, L. V., Spencer, H. K., Severnak, S. A.: *Tetrahedron Lett.*, **1988**, 29, 6827-6830.

Táto publikácia bola vytvorená v rámci projektu „Centrum pre priemyselný výskum optimálneho spôsobu syntézy vysoko účinných liečiv“ ITMS 26240220061 na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja

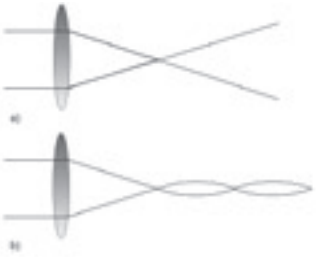
Využitie laserovej filamentácie pri bezkontaktnej "stand-off" detekcii chemických látok

M. Držík, D. Lorenc, I. Bugár, M. Jerigová, D. Velič
Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 814 04 Bratislava.

Súčasnosť ponúka množstvo moderných analytických techník ako napr. HPLC, rôzne varianty hmotnostnej spektrometrie, EPR, NMR, konvenčnú a laserovú optickú a IČ spektroskopiu a ďalšie. Ich spoločnou nevýhodou ale je nutnosť lokalizovanej analýzy vzorky priamo v prístroji resp. in-situ bez možnosti bezkontaktnej detekcie a analýzy "na diaľku." Niektoré techniky ako napr. LIBS (Laser Induced Breakdown Spectroscopy) v tomto smere síce ponúkajú určitú flexibilitu, ale vzdialenosti na úrovni desiatok a stoviek metrov, resp. kilometrov zostávajú pre ne nedostupné.

V prípadoch, kedy je potrebné vykonávať vzdialenú detekciu škodlivých resp. nebezpečných látok v atmosfére, vykonávať dlhodobý hĺbkový monitoring atmosféry a podobne vstupujú do hry progresívne metódy, z ktorých niektoré sú uvedené na obr.1. Prvou je LIDAR (LIght Detection And Ranging) teda v podstate optický ekvivalent radaru, ktorého počiatky siahajú do 60-tych rokov 20-teho storočia (obr1a). Systém je citlivý a umožňuje detekciu fingerprintov molekúl na vzdialenosti jednotiek kilometrov ale vyžaduje prítomnosť aerosólov resp. rozptylových častíc v atmosfére. Časť žiarenia po spätnom roztpyle (napr. na mraku) prechádza sledovanou oblasťou a je zachytávaná ďalekohľadom a vyhodnocovaná spektroskopicky. Ďalšou zaujímavou alternatívou je optická THz spektroskopia (obr.1b), ktorá má navyše tú výhodu, že THz žiarenie bez ťažkostí preniká niektorými materálmi ako sú textílie a plasty. Táto oblasť je ale stále ešte značne neprebádaná a pri absencii vhodných zdrojov aj detektorov aktuálne ťažko implementovateľná do praxe.

Veľmi zaujímavou alternatívou, navyše kombinovateľnou s predchádzajúcimi dvoma prístupmi, je laserová filamentácia (obr.1c). Konvenčný proces fokusácie šošovkou v tzv. lineárnom režime známy ešte z učiva základnej školy prebieha v súlade s obr. 2a. V priblížení geometrickej optiky zväzok rovnobežných lúčove po prechode šošovkou prechádza bodom, ktorý sa nazýva ohnisko a ďalej sa potom rozbieha. Pri dostatočne vysokých intenzitách žiarenia sa ale rozbiehavý zväzok opäť fokusuje (samofokusácia) a vzniká aj niekoľko po sebe nasledujúcih ohnísk (obr. 2b). Tento jav sa makroskopicky prejavuje ako kanálik (filament) v ktorom sa udržiava vysoká hodnota intenzity žiarenia (~ 1012 W/cm²) bez toho, že



Obr.2 Konvenčná fokusácia a) a nelineárna fokusácia so vznikom filamentu b).

by dochádzalo k rozbiehaniu zväzku. Následne sa vďaka procesom akými sú straty žiarenia absorpciou v plazme a zmena časovej dĺžky optického impulzu filament preruší a nasledujúce šírenie zväzku už opäť prebieha v súlade s geometrickou optikou. K uvedenému javu dokonca dochádza aj bez použitia akejkoľvek šošovky, tzn. zväzok s dostatočnou intenzitou sa v materiálovom prostredí, akým je aj vzduch, bude postupne fokusovať a vznikne filament. Uvedené riešenie je elegantné v tom, že zmenou parametrov je z fyzikálneho hľadiska možné filament projektovať kdekoľvek v priestore. V princípe je tak možné získať lokalizovaný zdroj vysokovýkonného žiarenia v ľubovoľnej vzdialenosti aj keď praktické limitácie v dnešnej dobe neumožňujú projekciu na vzdialenosti väšie než rádovo kilometer. Akonáhle je k dispozícii vzdialený zdroj, môže byť časť žiarenia, ktoré vysiela v spätnom smere k pozorovateľovi po prechode študovaným systémom vyhodnotená podobne ako v prípade LIDARu z obr. 1a. Alternatívne môže filament priamo v študovanom systéme vybudzovať fluoresceniu, podobne ako v prípade LIF (Laser Induced Fluorescence) alebo ionizáciu ako pri LIBS. V každom prípade ale detekčná schéma využíva ďalekohľad a analýzy prostredníctvom absorpčnej alebo emisnej spektroskopie.

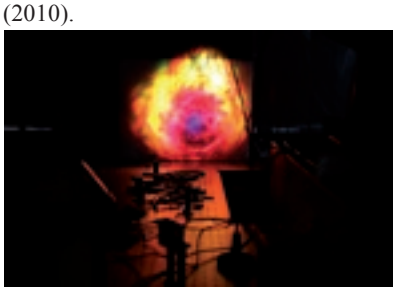
V prípade z obr.1b je dokonca možné z fluorescencie vybudenej filamentom extrahovať THz signál, ktorý obsahuje fingerprinty organických molekúl. Experimenty z posledného obdobia naznačujú, že je možné nastaviť také fyzikálne parametre aby sa filament správal doslova ako laserový zdroj v spätnom smere. Podobné výsledky by v dohľadnej budúcnosti mohli vyvolať revolúciu v oblasti ďiaľkovej detekcie a identifikácie chemických látok.

Experimenty v oblasti laserovej filamentácie prebiehajú aj na pôde novootvoreného Laboratória ultrarýchlej laserovej fotoniky v Bratislave (ChemZi 7/14) . Hlavný dôraz je pritom kladený na využitie filamentácie pri návrhu nových vysokovýkonných THz zdrojov (obr.3).

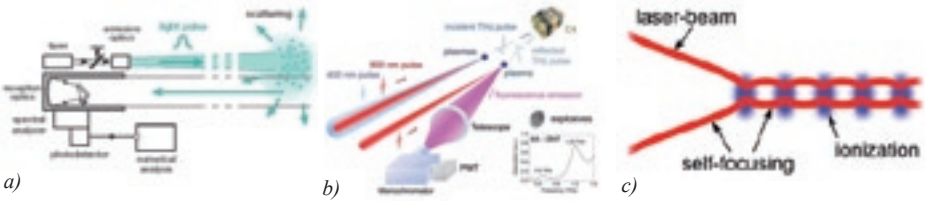
Poďakovanie

Táto publikácia bola vytvorená v rámci realizácie projektu metaQUTE-Centrum excelentnosti kvantových technológií, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj zo zdrojov Európskeho programu regionálneho rozvoja.

http://en.wikipedia.org/wiki/LIDAR
S.L. Chin, Femtosecond Laser Filamentation, (Springer, 2010)
J. Liu. Et. Al., Nature Photonics 4, 627 (2010).



Obr.3 Laserová filamentácia na pôde laboratória LULF.



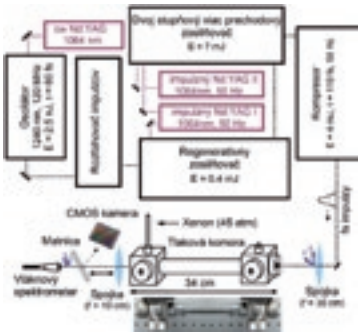
Obr.1 Diaľková detekcia pomocou LIDARu a) a optickej THz spektrokopie b). Laserová filamentácia c).

Spektrálne rozšírenie femtosekundových impulzov pri vysokých tlakoch

Ľudovít Haizer[a,b], Ignác Bugár[a], Dušan Lorenc[a]
[a]Medzinárodné laserové centrum, Bratislava
[b]Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Bratislava
Kontakt: I. Bugár
E-mail: bugar@ilc.sk, Tel. : 02/654 21 575, fax 02/654 23 244

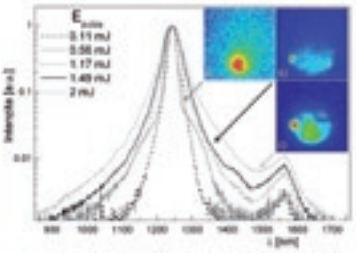
Spektrálne rozšírenie laserových impulzov v dôsledku nelineárnych procesov vyvolaných vysokým výkonom poľa vo veľmi krátkych časových intervaloch umožňuje generáciu široko spektrálneho svetelného kontinua zvaného aj superkontinuum. To môže pokrývať aj niekoľko oktáv vlnových dĺžok oproti pôvodnej spektrálnej šírke generujúcich impulzov. Hlavný nelineárny proces, ktorý je za tento efekt zodpovedný je Kerrova nelinearita v opticky transparentných materiáloch. Jej pôsobením dochádza k zmenám indexu lomu materiálu v závislosti od intenzity. V časovej doméne to priamo vedie ku vzniku nových frekvencií a generácii širšieho spektra. V priestorovej doméne Kerrova nelinearita spôsobuje samofokusáciu alebo defokusáciu laserového zväzku [1]. Pri vhodne zvolených podmienkach môže viesť samofokusácia ku kompenzácii rozbiehavého charakteru laserového zväzku a laserový impulz sa bude šíriť v samoindukovanom vlnovode. K tomuto javu dochádza pri interakcii veľmi krátkych a intenzívnych impulzoch s prostredím s kladnou hodnotou Kerrovej nelinearity a nazýva sa filamentácia. V procese filamentácie nekompenzuje samofokusácia len prirodzený rozbiehavý charakter zväzku, ale aj defokusáciu od slabej plazmy ktorá vzniká prevažne tunelovou ionizáciou pri takto vysokých výkonoch poľa [2]. Vzniknutý filament si zachováva svoju šírku zväzku aj pri šírení na dlhých vzdialenostiach a vo svojom jadre má akoby uváznenú rovnakú intenzitu pozdĺž celej dĺžky filamentu. Proces filamentácie sa využíva aj pri generácii superkontinua obzvlášť efektívne vo vzácnych plynoch, ktoré majú vysokú hodnotu Kerrovej nelinerity. Filament efektívne predlžuje interakčnú dĺžku s konštantnou uváznenou intenzitou v prostredí, čo umožňuje pôsobenie ďalších nelineárnych procesov. Generácia filamentov pomocou femtosekundových Ti:zafírových laserov s TW špičkovým výkonom, umožnila realizáciu rôznych experimentálnych prác zameraných na LIDAR diagnostiku, získavanie širokého a intenzívneho superkontinua, alebo generáciu časovo veľmi krátkych impulzov na úrovni niekoľkých oscilácií poľa s extrémne vysokými špičkovými výkonmi.

V tomto príspevku predkladáme alternatívny prístup k dosiahnutiu širokospektrálnych impulzov v blízkej IČ obasti s využitím femtosekundového Cr: Forsteritového laserového systému pracujúceho pri vlnovej dĺžke 1240 nm [3]. Impulzy z laserového systému boli fokusované šošovkou s ohniskovou vzdialenosťou 30 cm do tlakovej komory napustenej vzácnym plynom xenónom na tlak 45 atmosfér. Výstupné impulzy so špičkovými výkonmi v oblasti GW indukujú vplyv nelineárnej interakcie pri takto vysokých tlakoch. Pri experimentoch skúmajúcich spektrálne rozšírenie bola prítomnosť a vplyv filamentov vo výstupnom zväzku paralelne monitorovaná pomocou CMOS kamery, schéma experimentálnej zostavy je na Obr. 1.



Obr. 1 Schéma femtosekundového Cr:forsteritového laserového systému so znázornením prechodu fs impulzov cez tlakovú komoru a registráciou pomocou CMOS kamery a vláknového spektrometra

Počas tohto štúdia bolo zaznamenané pomerne veľké spektrálne rozšírenie v xenóne so znakmi nelineárneho ionizačného procesu. Kamerové záznamy potvrdili vplyv filamentov spôsobujúcich zúženie šíriaceho sa zväzku pri vyšších intenzitách, záznamy spolu so získanými spektrálnymi rozšíreniami sa nachádzajú na Obr. 2. Nelineárny proces filamentácie jasne podporuje generáciu širšieho spektra oproti stavom keď bol pozorovaný širší charakter šíriaceho sa zväzku. Pri zvyšujúcej sa intenzite dochádza k zväčšovaniu jadra filamentu až sa pri prekročení istého intenzitného prahu rozpade na viacero užších filamentov [4]. Hodnoty prahu intenzity pre vznik filamentu a jeho rozpad boli odhadom určené zo simultálnych záberov a vstupných intenzít impulzov. Tieto hodnoty 26×1013 W/cm² pre vznik a 104×1013 W/cm² pre rozpad na viacero filamentov sú v dobrej zhode s výsledkami experimentov Rollanda a Corkuma uskutočnenými pre plyn xenón pri tlaku 40 atm s vlnovou dĺžkou 625 nm ktoré stanovujú prah vzniku filamentu rádovo na 1013 W/cm² [5]. Jemný modrý posuv spektra s narastajúcou intenzitou je ďalším znakom prítomnosti ionizačnej nelinearity, zohrávajúcej dôležitú úlohu aj pri tvorbe filamentov. Maximálne spektrálne rozšírenie získané pri tlaku 45 barov dosahovalo až dvojnásobnú šírku oproti pôvodným impulzom a prinieslo nárast spektrálnej intenzity v oblasti od 900 až po 1600 nm [6]. Tieto výsledky naznačujú možnosť prípravy impulzov s dĺžkami kratšími ako 100 fs pri vlnovej dĺžke 1240 nm, za limitujúcou hranicou spektrálnych vlastností daného zosilňovača. Naviac, impulzy so šírkou spektra okolo 700 nm sú využiteľné pre optické parametrické zosilňovače ku generácii extrémne intenzívnych polí v spektrálnej oblasti, ktorá je ťažko dosiahnuteľná pomocou štandardných Ti:zafírových laserov.



Obr. 2 Spektrálne rozšírenie femtosekundových impulzov pri 1240 nm v závislosti od vstupnej energie impulzov pri tlaku 45 atm xenónu spolu s kamerovými záznamami profilu výstupného zväzku v troch pozorovaných režimoch (a) bez filamentácie pri energii 0,56 mJ, (b) jeden filament - 1,49 mJ a (c) viac filamentov - 2 mJ.

Poďakovanie

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE - Centrum excelentnosti kvantových technologií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

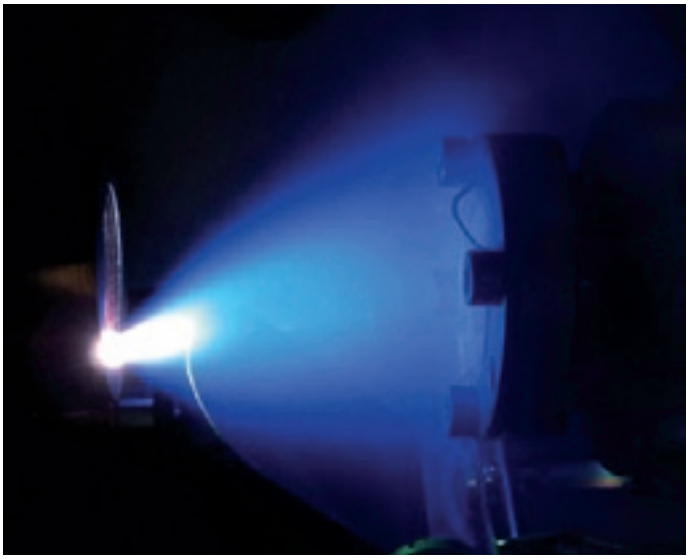
Literatúra

[1] A. Couairona, A. Mysyrowiczb, Physics Reports 441, 47 (2007)
[2] S. L. Chin, *Femtosecond Laser Filamentation* (Springer, New York, 2010)
[3] Haizer, L., Bugár, I., Lorenc, D., Buczynski, R., Uherek, F.: Nonlinear spectral broadening of femtosecond Cr: Forsterite laser pulses in multicomponent glasses, JMO 56, 67 (2011)
[4] R.W. Boyd, S.G. Lukishova, and Y.R. Shen, *Self-Focusing, Past and Present*, (Springer, Berlin, 2009)
[5] *The Supercontinuum Laser Source*, Ed. by R. R. Alfano (Springer, New York, 1989)
[6] Haizer, L., Bugár, I., Lorenc, D., Uherek, F., Zheltikov, A. M., Goulielmakis, E., Krausz, F.: Ionization assisted nonlinear spectral broadening of femtosecond Cr:Forsterite pulses in high pressure gas media, *LPHYS'11, 20th International Laser Physic Workshop*, Book of abstracts, Sarajevo (2011)

LaserlabForum

International Laser Centre, Bratislava

On March 15-16, the combined Kick-off and General Assembly Meetings of the third phase of LASERLAB-EUROPE took place in Bratislava, Slovakia. The event was hosted by the International Laser Centre (ILC). The Slovakian research centre is one of the institutes from new Member States that joined the consortium at the start of LASERLAB-EUROPE II in 2009. Time for a closer look.



Pulsed laser deposition of thin films.

The International Laser Centre in Bratislava was established by the Ministry of Education of the Slovak Republic in January 1997 with the aim to build a joint research platform of excellence in photonics and laser technologies in Slovakia. ILC was founded as an independent institution and is located in the area of the Slovak University of Technology and Comenius University in Bratislava.

Originally, the ILC was launched as an inter-governmental project aimed at the development of advanced experimental infrastructure, allowing to foster collaborative research and applications in industry and health care. The project was based on the contract between ILC in Bratislava and the International Laser Center of Moscow State University (MSU).

In the years 1997-2007, the ILC was funded with equipment in the equivalent of 18 million USD from the resources related to the debt of the Russian Federation towards the Slovak Republic. As a result, a set of unique research labs was created spanning from ultrafast spectroscopy, material analysis, information technology to nano- and bio-medical sciences.

In 2007 ILC reached the steady-state operation with 23 employees. It is now composed of two departments – the Department of Laser Technologies and the Department of Biophotonics. The structure of ILC is completed by joint external laboratories at nearby institutions. ILC thus provides a wide inter-disciplinary infrastructure for basic and applied research and development in many fields of laser-based and photonic technologies, available for researchers throughout Slovakia.

The third phase of the ILC development is taking place since 2008 and can be characterized by an effort to integrate ILC into the existing European scientific structures. Several EU funded projects, aimed at the integration and the support of research teams operating in the field of nanotechnologies, molecular electronics and biophotonics, helped ILC to develop the technical infrastructure for the creation and diagnostics of nanostructures and nanomaterials, components for molecular electronics and integrated photonics devices.

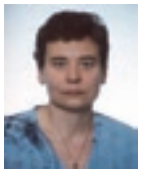
Another important achievement is the establishment of the Laboratory of Ultrafast Laser Photonics (LULPH) at the beginning of 2012. The LULPH is a joint laboratory between ILC, Comenius University and the Slovak Academy of Sciences which targets the areas of ultrafast time-resolved chemistry, high-field THz science and laser-plasma interaction in the strong-field regime.

In addition to the local environment, research and teaching activities at ILC are closely related to international organizations and projects, such as LASERLAB-EUROPE. To foster a wide collaboration by providing experiments in European research centres, ILC entered the LASERLAB-EUROPE network in 2009. Our main tasks in LASERLAB were to develop a setup for multi-spectral fluorescence lifetime imaging microscopy with non-linear excitation within the OPTBIO JRA, and to manage the user community training activities. Hosting the LASERLAB III Kick-off and General Assembly meetings in Bratislava was a great opportunity for ILC to present our achievements to our partners and strengthten the social and scientific contacts within the LASERLAB consortium.

Dusan Chorvat and Ljuba Bacharova
http://www.ilc.sk/en/

White-light continuum generated by a high-power femtosecond laser.

Kandidáti na členov Predsedníctva SCHS pre funkčné obdobie 2013-2016



Prof. Ing. Vlasta Brezová, DrSc. je pracovníčkou Ústavu fyzikálnej chémie a chemickej fyziky FCHPT STU. Pracuje v oblasti EPR spektroskopie, s hlavnou orientáciou výskumu na fotochemicky iniciované reakcie, kinetiku, mechanizmy a štruktúru paramagnetických medziproduktov.

Od roku 2007 je členkou Slovenskej chemickej spoločnosti a v poslednom funkčnom období aj členkou predsedníctva SCHS, spravuje a aktualizuje databázu členov SCHS.

Ing. Zuzana Hloušková je pracovníčkou Ústavu polymérov SAV. Je absolventkou FCHPT STU v Bratislave. Od 1993 pracuje ako vedúca Ekonomického oddelenia ÚPo SAV. V roku 1984 vstúpila do Slovenskej chemickej spoločnosti a v Predsedníctve SCHS pracuje vo funkcii hospodára. Aktívne sa zúčastňuje prác súvisiacich s organizovaním Zjazdov chemických spoločností.

Mgr. Katarína Javorová, je absolventkou Prírodovedeckej fakulty UK v Bratislave a od r. 2008 je doktorandkou na PriF UK v Bratislave, na Katedre didaktiky prírodných vied, psychológie a pedagogiky. Jej hlavnými činnosťami je vyučovanie prírodovedných predmetov a s tým súvisiace hodnotenie žiakov, vzdelávanie učiteľov, tvorba stratégií vzdelávania a metodík pre implementáciu IKT do vyučovania.

Od roku 2008 je členkou SCHS, v posledných rokoch sa podieľala na organizovaní Letnej školy chemikov. Od roku 2009 pracuje v predsedníctve SCHS.

RNDr. Monika Jerigová PhD. bola v predchádzajúcom období aktívnou členkou predsedníctva Slovenskej chemickej spoločnosti, zodpovednou za korektúry časopisu ChemZi v rámci redakčnej rady. V rokoch 2005, 2007, 2009 a 2011 bola výkonným tajomníkom organizačného výboru Zjazdu chemikov a s jej významným prispením nabralo toto podujatie na renome a kvalite.

Monika Jerigová - Aranyosiová je absolventkou Prírodovedeckej fakulty UK v odbore Fyzikálna chémia a držiteľkou titulu PhD. v rovnakom odbore. Medzi jej odborné záujmy patrí oblasť hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov.

Mgr. Stanislav Kedžuch PhD., v rokoch 1996-98 úspešne reprezentoval Slovensko na Medzinárodných chemických olympiádach (bronzová medaila Moskva 96, 2x strieborná medaila Montreal 97, Melbourne 98). Je absolventom Prírodovedeckej fakulty UK. Na ÚACh SAV absolvoval doktorandské štúdium v roku 2007. Od roku 1998 spoluorganizuje aktivity Chemickej olympiády, kde je autorom úloh a organizuje Korešpondenčný seminár z chémie pre stredoškolskú mládež.

Ing. Andrej Kolarovič je absolventom FCHPT STU v Bratislave, kde obhájil aj doktorandskú prácu (2003). Počas doktorandského štúdia absolvoval výskumný pobyt v Nemecku a pôsobil ako postdoktorand Padovskej univerzite v Taliansku, pričom sa venoval vývoju a syntéze nových katalyzátorov pre asymetrickú syntézu. V marci 2006 nastúpil na miesto odborného asistenta na Oddelení organickej chémie FCHPT STU v Bratislave. V r. 2010 mu bolo udelené postdoktorandské štipendium v Rakúsku, kde sa zaoberal využitím katalytických dekarboxylácií v "klik"-chémii.

Ing. Vladimír Mastihuba, PhD. je absolventom Katedry biochemickej technológie FCHPT STU, doktorandské štúdium absolvoval na Katedre Organickej chémie a od r. 1994 pracoval na Katedre mlieka, tukov a hygieny požívatín (terajšie Oddelenie potravinárskej technológie FCHPT) ako odborný asistent. Od roku 2006 pracuje na Chemickom Ústave SAV, kde sa venuje aplikácii biokatalýzy v organickej syntéze. Od roku 2006 je členom odbornej skupiny SCHS pre Sacharidy a glykokonjugáty, od roku 2011 je prizvaným členom Predsedníctva SCHS.

Doc. Ing. Ján Reguli, CSc. je absolventom Katedry fyzikálnej chémie FCHPT STU, na ktorej pracoval do roku 2006. Od roku 1999 pracuje na Katedre chémie Pedagogickej fakulty Trnavskej univerzity, v súčasnosti ako jej vedúci. Od roku 2009 je predsedom odbornej skupiny SCHS pre vyučovanie chémie. Je členom SKCHO, dlhoročným autorom úloh CHO z fyzikálnej chémie a odborným garantom Letnej školy chemikov.

RNDr. Jozef Tatiersky, PhD., vysokoškolský učiteľ na Katedre anorganickej chémie Prírodovedeckej fakulty UK v Bratislave. Venuje sa koordinačným zlúčeninám vanádu(V) so zameraním na stereochemické ich atribúty a chiroptické vlastnosti. Každoročne sa zúčastňuje ako lektor na Letnej škole chemikov pre riešiteľov chemickej olympiády zo stredných škôl. Ako doterajší člen predsedníctva SCHS sa venoval oblasti chemickej olympiády a legislatívy SCHS.

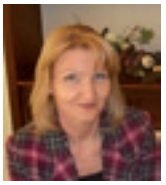
Kandidáti na členov Revíznej komisie SCHS pre funkčné obdobie 2013-2016

RNDr. Slávka Hamuľaková, PhD., študovala na na Prírodovedeckej fakulte UPJŠ v Košiciach, odbor: anorganická chémia. Od roku 1993 je vedeckou pracovníčkou na Katedre organickej chémie na PF UPJŠ v Košiciach. Jej výskumné zameranie je organická syntéza, chémia heterocyklov, deriváty takrinu ako inhibítory cholínesteráz.

Je predsedníčkou Odbornej skupiny pre organickú chémiu Slovenskej chemickej spoločnosti v Košiciach.

Ing. Michal Korenko, PhD., je absolventom Fakulty chemickej a potravinárskej technológie STU Bratislava (1998). Od r. 2003 pracuje v Oddelení taveninových sústav Ústavu anorganickej chémie SAV. Vedecky sa profiluje vo fyzikálnej chémii a elektrochémii taveninových sústav; najnovšie aj výskum vybraných fyzikálnochemických vlastností priemyselne významných taveninových elektrolytov na báze Al, Nb a Ta.

V minulom období bol predsedom OS Anorganická chémia, Bratislava, a v končiacom sa volebnom období P SCHS je predsedom Revíznej komisie SCHS.



Doc. RNDr. Renáta Oriňáková, PhD., je vedúcou Katedry fyzikálnej chémie ÚCHV PF UPJŠ v Košiciach. Jej výskum je v zameraný na elektrochemickú prípravu a charakterizáciu kovových, polymérnych a kompozitných nanovrstiev s definovanou funkcionalitou s cieľom ich implementácie do miniaturizovaných analytických systémov.

Členkou SCHS je od roku 2001. V období 2004 – 2008 pôsobila ako tajomníčka Odbornej skupiny pre fyzikálnu chémiu a elektrochémiu v Košiciach a od decembra 2008 je predsedníčkou Odbornej skupiny pre fyzikálnu chémiu a elektrochémiu v Košiciach.

Zasadnutie Asociácie slovenských chemických a farmaceutických spoločností (ASCHFS)

Cirkulácia vo funkcii predsedu ASCHFS; bola diskutovaná otázka voľby nového predsedu ASCHFS; doc. Drábik oslovil predsedu a podpredsedu SSBMB (prof. Turňa a doc. Breier) v súvislosti s faktom, že predstaviteľ tejto Spoločnosti dosiaľ vo funkcii predsedu ASCHFS nepracoval. Predstavitelia SSBMB navrhujú do funkcie predsedu ASCHFS prof. RNDr. J. Lehotského, DrSc. – člena výboru SSBMB. Návrh je predložený v zmysle Dohody ASCHFS a prijatých zásad rotácie funkcie predsedu ASCHFS). Prof. RNDr. J. Lehotský, DrSc. bol vo funkcii potvrdený per rollam stanoviskami predsedov združených Spoločností. Obsadenie funkcie predseduASCHFS na nasledujúce obdobie nominantom SSBMB - prof. RNDr. J. Lehotský, DrSc. z Jesseniovej lekárskej fakulty UK v Martine umožní pokračovať v účelnej práci ASCHFS a zachovať jej široký dopad na združené Spoločnosti.

M. Drábik

Zasadnutie Slovenského národného komitétu Medzinárodnej únie pre čistú a aplikovanú chémiu (SNK IUPAC).

K 24. mája 2012 je aktuálny zoznam členov SNK IUPAC nasledovný:

Doc. RNDr. Milan Drábik, CSc., predseda
Doc. Ing. Dušan Berek, DrSc., podpredseda
Prof. Ing. Eberhard Borsig, DrSc.,
Prof. Ing. Vlasta Brezová, DrSc.,
Prof. RNDr. Juraj Černák, CSc.,
Prof. Ing. Ján Garaj, DrSc.,
Prof. RNDr. Vladislav Holba, DrSc.,
Ing. Michal Korenko, PhD.,
Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc.,
Ing. Igor Lacík, DrSc.,
Prof. RNDr. Fedor Macášek, DrSc.,
Prof. Ing. Viktor Milata, DrSc.,
Ing. Mária Omastová, DrSc.,
Doc. RNDr. Martin Putala, PhD.,
Ing. Marek Stach, PhD.,
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc. – tajomníčka.

Listom od generálneho sekretára IUPACu (prof. Deplanque, 22. 05. 2012) bol vyhlásený termín a podmienky nominácií do výborov a komisií divízií IUPACu na obdobie 2014-15. SNK po diskusii navrhuje nasledovné nominácie:

Doc. RNDr. Milan Drábik, CSc., divízia II. anorganická chémia, TM, renominácia

Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc., divízia V. analytická chémia, TM, renominácia

Ing. Igor Lacík, DrSc., divízia IV. polyméry, AM, renominácia

Prof. Ing. Viktor Milata, DrSc., divízia III. organická chémia, nominácia

Doc. RNDr. Martin Putala, PhD., divízia VIII. názvoslovie a štruktúrna reprezentácia, nominácia

Ing. Michal Korenko, PhD., div. I. fyzikálna a biofyzikálna chémia (interdivízna komisia pre materiálovú chémiu), nominácia

M. Drábik

Názvoslovné okienko

Ako prekladať anglický výraz nanotube

Nanomateriály a nanotechnológie prenikajú do nášho vedeckého i každodenného života. Niekedy je problém nájsť ten správny výraz pre slovné spojenie či pomenovanie, ktoré preberáme z angličtiny. Jedným z takýchto výrazov je carbon nanotubes. V slovenskej vedeckej obci sa prekladá rôzne, preto sme sa obrátili s touto otázkou na Jazykovedný ústav Ľudovíta Štúra SAV. Z jazykovej poradne nám odpovedala PhDr. Katarína Kálmánová.

Slovenským ekvivalentom anglického výrazu nanotube, ktorým sa pomenúva miniatúrna rúrka, môžu byť výrazy **nanorúrka, nanotrubička** alebo zriedkavejšie nanohadička (hadička = ohybná rúrka, významy slov trubička, rúrka a hadička si môžete preštudovať v lexikografických príručkách na www.juls.savba.sk – cez ďalšie pramene v elektronickej podobe). Z nich ako najvhodnejšia sa ukazuje podoba na**norúrka**. Anglické spojenie carbon nanotubes teda možno preložiť do slovenčiny ako uhlíkové nanorúrky, ale aj ako uhlíkové nanotrubičky. Uvedené výrazy sa v súčasnosti v slovenčine používajú a sú spisovné. Okrem nich sa niekedy používa aj pomenovanie nanotuba *(uhlíkové nanotuby)*, ktoré však nezodpovedá spisovnej slovenčine a neodporúča sa preto používať. Slovo tuba má totiž v slovenčine iné významy, a to: 1. „pružný obal rúrkovitého tvaru na uchovávanie polotuhých látok, napríklad tuba lepidla, tuba hočice“; 2 „rúrkovitá schránka, napríklad *tuba celaskonu, tuba s diplomom*“; 3. „plechový hudobný nástroj“. Samozrejme, ak má slovenský ekvivalent anglického výrazu carbon nanotube plniť funkciu odborného termínu, treba sa zjednotiť na jednej podobe, čo je už úloha pre odborníkov z danej oblasti. V preklade Vám odporúčame používať iba jeden z variantov slovenského termínu.

Pre tých, ktorí by sa radi dozvedieť viac o uhlíkových nanorúrkach, odporúčame webovú stránku http://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_nanotube.

M. Omastová

Oznam pre čitateľov časopisu ChemZi

Redakcia menovaného časopisu mieni zaradiť pravidelnú rubriku „Názvoslovné okienko“. Účelom tejto rubriky by malo byť vzájomné informovanie sa o nesprávnych prípadne nejednotných názvov chemických látok, procesov alebo o nenáležitých prekladoch anglických slov z chemických textov do slovenčiny. Pri riešení otvorených otázok budeme využívať našich členov medzinárodných názvoslovných komisií.

Každý príspevok alebo návrh bude vyznačený jeho autorom. Svoje návrhy môžete zasielať na adresu: Eberhard.Borsig@savba.sk .

Zodpovedný: E. Borsig

Mapa web stránky SCHS

Na webovej stránke SCHS (www.schems.sk) je možné nájsť viaceré užitočné informácie, avšak niekedy je orientácia aj vzhľadom na snahu umiestniť na nej čo najviac materiálov ťažšia, a tak pristupujeme k zverejneniu mapy webovej stránky, ktorá bude zverejnená aj na samotnej webovej stránke.

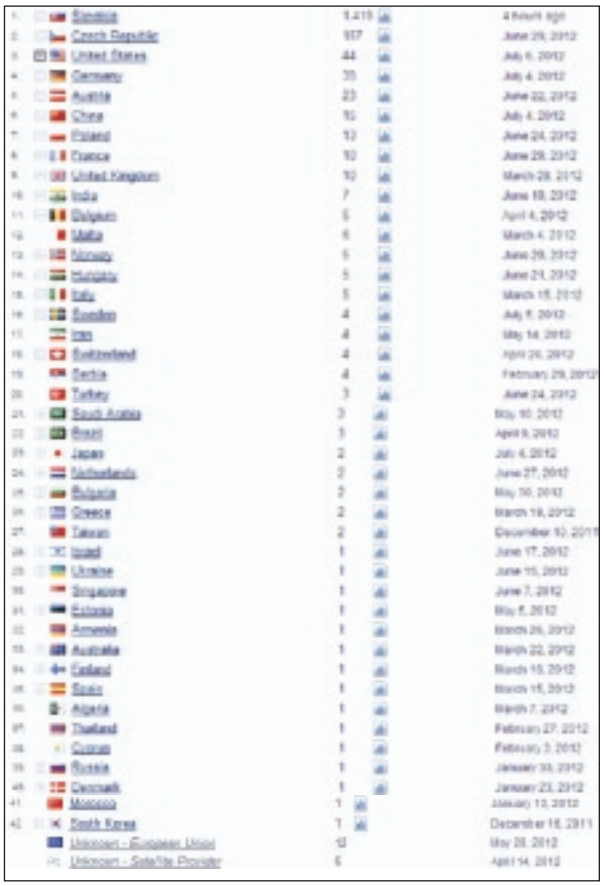
1. **Hlavná stránka**
2. **Aktuality**
2.1 SCHS
2.2. Prednášky
2.3. IUPAC
2.3.1. SNK IUPAC
2.4. EUCHEMS
2.5. ChemPubSoc
2.6. ECTN
2.7. EuroChemist
2.8. ACS
2.9. GDCh
2.10. RSC
2.11. Ponuky
3. **Prednášky**
3.1. Chemické horizonty
3.1.1.-4. 2011 – 2012 – 2013 – 2014
3.2. Chemické horizonty: Archív
3.2.1.-8. 2005 – 2006 – 2007 – 2008 – 2009 – 2010 – 2011 - 2012
3.3. Novartis
3.4. Heyrovský-Ilkovič-Nernst
4. **Kontakty**
5. **Konferencie**
5.1.-4. 2010 – 2011 – 2012 – 2013
5.5. Archív
5.5.1.-4. 2006 – 2007 – 2008 – 2009
6. **64. zjazd chemikov**
7. **65. zjazd chemikov**
8. **Pedagogika**
8.1. Stredné školy
8.2. Vysoké školy
8.3. Názvoslovie
8.4. Užitočné materiály a prednášky
8.5. Linky, odkazy
8.6. Chemická olympiáda
8.6.1. Chemické rozhľady
8.6.2. Kategórie
9. **Životné prostredie**
10. **Priemysel**
10.1. Sigma-Aldrich
10.2. Zentiva
10.3. Merck
10.4. BASF
10.5. ITES
10.6. Shimadzu
10.7. Slovnaft
10.8. Novartis
10.9. Incheba
10.10. Pragolab
11. **Fotogaléria**
11.1. Aktuálne fotky (2010-2012)
11.2. Fotoarchív (2007-2009, Ľudia, Rôzne)
12. **ChemPubSoc Europe**
12.1. History
12.2. Journals
12.3. ChemistryViews
12.4. Open Access
12.5. Meetings
13. **ChemZi**
13.1.-8. 6/1 2010 – 9/2 2013
13.9. Archív
13.9.1.-10. 1/1 2005 – 5/2 2009
14. **Administratíva**
14.1. Kontakt
14.2. P-SCHS, V-SCHS
14.3. Stanovy a Kodex SCHS
14.4. Plán práce
14.5. Prihláška a výhody členstva SCHS
14.6. Odborné skupiny SCHS
14.7. Podpora SCHS a podpora mladých
14.8. EuroChemist
14.9. Členská základňa
15. **Archív**
15.1. Zápisnice
15.2. Materiály SCHS
15.3. Správy o činnosti
16. **Linky a odkazy**
16.1. Chemické spoločnosti
16.2. Organizácie súvisiace s chémiou
16.3. Chemické programy
16.4. Chemické časopisy a literatúra
16.5. Rôzne
17. **Ponuky**
18. **Zoznam členov**
19. **Voľby**
20. **Medzinárodný rok chémie 2011**
21. **Experiment Water**
22. **EC2E2NA conference**
23. **English version**
24. **Mapa stránky**

Veríme, že na webovej stránky Slovenskej chemickej spoločnosti nájdete vždy tú informáciu, ktorú hľadáte a tomuto cieľu má napomôcť aj táto mapa. Niektoré podstránky sa nachádzajú aj v dvoch miestach z dôvodu charakteru informácie so snahou orientovať na tú pozíciu, kde je informácia úplná. V prípade, že získané informácie nie sú úplné – aktuálne či podrobné dovoľujem si požiadať o spoluprácu s nami, aby sme náš spoločný web vylepšili, doplnili, tak ako existujú na ňom aj nenaplnené podstránky. Veríme, že web sa stane stále viac navštevovaným aj strednými školami. O počte a skladbe návštevníkov nášho webu k 10. júlu 2012 hovorí aj evidencia prístupov od 9.10.2011, odkedy našu webovú stránku navštívilo 1826 návštevníkov, ktorí si pozreli 8130 podstránok (4,45 podstránky na 1 prístup) celkovo zo 42 krajín sveta a to anglickú je len podstránka Kontakty. Zloženie návštevníkov je vidno z nasledujúceho obrázku

pričom po očakávanom druhom mieste českých návštevníkov nasledujú američania a nemeckí návštevníci. V dohľadnej dobe spustíme možnosť elektronickej voľby Predsedníctva SCHS ako aj možnosť úpravy svojich dát, tak aby ste nemuseli chodiť kvôli tomu na Sekretariát a informácie a materiály ste dostali vždy načas a aktuálne.

Veríme, že naša webová stránku bude čím ďalej kvalitnejšia a na jej obsahu sa bude podieľať aj Vy.

V. Milata



Predstavujeme Ing. Máriu Omastovú, DrSc.

Na Zjazde chemických spoločností 2011 v Tatranských Matliaroch bola Ing. Mária Omastová, DrSc. zvolená za budúcu predsedníčku Slovenskej chemickej spoločnosti na obdobie rokov 2013 - 2014. Preukázaná dôvera budúcej predsedníčke je aj prejavom uznania členov SCHS za jej doterajšiu užitočnú prácu v predsedníctve SCHS. Okrem plnenia povinností I. podpredsedníčky má na starosti aj organizáciu cyklu prednášok *Chemické horizonty*. Je predsedníčkou Odbornej skupiny SCHS *Polyméry*. Vďaka jej neustálej iniciatíve pri hľadaní a realizovaní nových vedecko-organizačných nápadov, patrí OS Polyméry medzi tie najaktívnejšie. Podieľa sa tiež na organizovaní sekcie *Organická chémia a polyméry* na Zjazdoch chemických spoločností organizovaných SCHS. Zastupuje Slovensko v Európskej polymérnej federácii a iniciatívne sa podieľa na práci tejto organizácie.

Za jej doterajšiu záslužnú prácu venovanú úspešnému rozvoju celej SCHS, ale aj na povzbudenie do ďalších rokov tvorivej práce pre chemickú obec, bola jej v marci 2012 udelená *Medaila SCHS*.

V tomto roku sme si pripomenuli významné životné jubileum Márie Omastovej. Počiatky jej bohatej vedeckej kariery začali v dedinke Batizovce pod Vysokými Tatrami. Strednú priemyselnú školu chemickú vo Svite, odbor fyzikálna chémia skončila veľmi úspešne a v štúdiu pokračovala na Chemickotechnologickej fakulte STU, kde si vybrala špecializáciu „Technická fyzikálna a analytická chémia“. Po úspešnej a aktívnej činnosti v ŠVOČke na Katedre fyzikálnej chémie CHTF STU sa jej naskytla príležitosť realizovať svoje záujmy pri vypracovaní diplomovej práce (1985) v Ústave polymérov SAV v Bratislave. V PhD dizertačnej práci sa venovala syntéze vodivého polyméru, polypyrolu v prítomnosti chlórchromanu pyrídia a štúdiu jeho vlastností (1993). Touto prácou vlastne aj začala rýchla vedecká kariéra Maji Omastovej. Ďalšími prácami a celkovým rozvojom tejto problematiky v oblasti štúdia syntézy a mechanizmu polymerizácie pyrolu ako aj jeho vodivosti priniesla rad nových významných poznatkov, ktoré obohatili oblasť výskumu a rozvoja vodivých polymérov a vytvorila tak vedeckú školu v oblasti vodivých polymérov v Ústave polymérov SAV. Tieto poznatky zhodnotila v značnom počte publikácií, ktoré vyvolali aj priaznivú odozvu v odbornej tlači (doteraz vyše 1000 SCI citácií na viac ako 70 vedeckých článkov). Ďalej študovala vplyv elektricky vodivých nanočastíc ako sú uhlíkové nanotrubičky na vodivosť ako aj ďalšie fyzikálne a mechanické vlastnosti vodivých kompozitov s polymérnou matricou. Vysoká vedecká produktivita a dosiahnuté výsledky prispeli aj k pomerne rýchlemu udeleniu titulu DrSc. v roku 2009.

Na úspešnosť vedeckej činnosti Márie Omastovej poukazuje aj značný počet spoluprác s vedeckými inštitúciami a univerzitami v Českej republike, Maďarsku, Poľsku, Nemecku, Francúzsku a Grécku. Post-doktorandskú stáž absolvovala v Nemecku a potom nasledoval rad pozvaní na stáž do USA, Francúzska a opakovane do Nemecka.

Pracuje na projektoch, ktoré by mali zlepšiť kvalitu života slabozrakých a nevidiacich. V rámci riešenia projektu 7RP EÚ vyvíja skupina vedeckých pracovníkov dotykový displej, ktorý dokáže fyzicky zobraziť grafy či obrázky.

A to je len jedna zo zaujímavých oblastí, na ktorých spolu so svojím tímom pracuje. Doterajšie pracovné aktivity a dosiahnuté úspechy boli zhodnotené v mnohých oceneniach.

V roku 2011 v hodnotení ARRA agentúry v rámci „identifikácie špičkových vedeckých tímov a ich členov v SAV“ bol tím Márie Omastovej zaradený do kategórie *špičkový*.

Vedecká rada Slovenskej akadémie vied dňa 20.06.2012 udelila Cenu SAV v roku 2012 aj kolektívu pracovníkov Ústavu polymérov SAV v zložení: Ing. Mária Omastová, DrSc., Ing. Matej Mičušík, PhD., Mgr. Silvia Podhradská, PhD., Mgr. Katarína Mosnáčková a Ing. Klaudia Czaniková, za súbor vedecko - výskumných prác v interdisciplinárnom výskume elektricky vodivých polymérnych kompozitov a nanokompozitov.

Významným ocenením je aj prijatie Márie Omastovej, DrSc. za členku Učenej spoločnosti, ktorá je čestným orgánom Slovenskej akadémie vied (19. jún 2012).

Milá Maja, chceme Ti v mene celej chemickej obce popriať všetko najlepšie, aby si si udržala aj naďalej ten Tvoj veľký pracovný zápal, dobré zdravie, dobrých spolupracovníkov a priateľov, čo Ti potom iste dodá aj optimizmus a šťastie v ďalšom živote.

E. Borsig a P. SCHS

Noví členovia SCHS

- Mgr. Miroslav Almáši,
- Bc. Adrián Krajňák,
- Mgr. Katarína Lacková,
- Mgr Katarína Homzová,
- Mgr. Nela Farkašová,
- Ing. Andrej Kolarovič, PhD.,
- Mária Spišáková,
- Ing. Kristína Matelková,
- Ing. Danica Čechová,
- Ing. Miroslava, Puchoňová,
- Ing. Jana Tabačiarová,
- Ing Kristína Plevová,
- Ing. Aleš Ház,
- Ing. Martina Botková,
- Mgr. Adriána Bednárová,
- doc. Ing. Jana Sádecká,
- PhD., Mgr. Katarína Uhlárová,
- Ing. Anna Országová,
- Mgr. Lucia Tomášová,
- Ing. Miroslava Lukešová,
- doc. Ing. Maroš Soldán, PhD.,
- Prof. Ing. Karol Balog, PhD.,
- Bc. Jana Holekšiová,
- Ing. Andrej Chyba,
- Bc. Erik Durkot,
- Ing. Jana Riecka,
- Mgr. Zuzana Poperníková,
- Ing. Petronela Vencelová,
- Ing. Ľuba Horbanová,
- Dan Pleceník Gašpar,
- Filip Nemčko,
- Zuzana Kohútová,
- Kristián Fónod.

ChemPubSoc je časopisom aj slovenských chemikov

Pred desiatimi rokmi bolo v podstate klasikou prezentovať kvalitné výsledky svojej vedeckej práce na stránkach chemických časopisov ACS alebo RSC, ktoré boli a sú zárukou kvality.

- ACS, American Chemical Society, vydavateľstvo Americkej chemickej spoločnosti
- RSC, Royal Society of Chemistry, vydavateľstvo Kráľovskej chemickej spoločnosti

Logickou protiváhou, popri komerčných vydavateľstvách ako Elsevier a Springer, bolo vytvorenie kontinentálneho Európske chemického vydavateľstvo.

- ChemPubSoc Europe, Chemistry Publishing Society, vydavateľstvo Európskych chemických spoločností prostredníctvom nakladateľstva Wiley-VCH

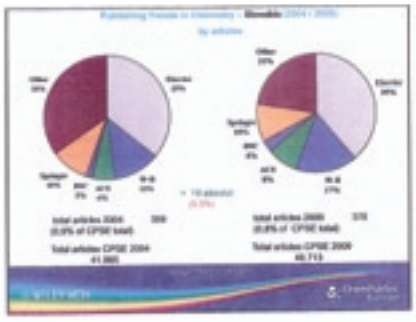
A to nielen z pohľadu parity, ale najmä z dôvodu, že veľká časť publikácií v časopisoch ACS a RSC boli pôvodom z kontinentálnej Európy. Išlo teda o paritu a tiež biznis, keďže publikačná činnosť z roka na rok narastá. Existovanie ChemPubSoc započalo oficiálne v roku 1995. Chronológia aktivít je znázornená na Obrázku 1. Chemické

Obr. 1. Chronológia CPSE

spoločnosti z celej Európy boli vyzvané participovať na tomto, priznajme, historickom projekte. Filozofiou tvorby nových časopisov pod hlavičkou ChemPubSoc bolo integrovať kapacity jednotlivých krajín smerom ku tvorbe kvalitných časopisov. Slovenskej chemickej spoločnosti sa podarilo stať asociovaným členom ChemPubSoc v roku 2009. Slovenská chemická spoločnosť má na Obrázku 1 označenie SChemS, zhodne s našou webovskou stránkou, čo je úplne v poriadku. Skratka krajiny ako SI sa asi ešte musí dostať do povedomia ako SK, hoci SI môžme vnímať ako asociáciu s Medzinárodnou sústavou jednotiek SI a tým sa vlastne dostávame veľmi blízko k exaktnej chémii.

Obr. 3. Publikačná aktivita Slovenska v chemických časopisoch v roku 2004 a 2009

ChemPubSoc v súčasnosti tvorí 16 Európskych chemických spoločností, spolu s 2 podporujúcimi, viď na Obrázku 2 chemickú európsku mapu. A toto konzorcium vydáva 10 časopisov s impozantnými impakt faktormi. Účasť Slovenskej chemickej spoločnosti pokladáme za úspech, ale aj záväzok. Úspech v tom, že sme na jednej úrovni s poprednými Európskymi chemickými spoločnosťami a vlastne sa pomaly stávame vlastníkom vydávaných časopisov. Tento proces je vlastne logický, keďže SCHS má určite najbližie ku kontinentálnym chemickým aktivitám v Európe v porovnaní s ACS alebo RSC. Ako chemická spoločnosť máme reálny priestor v kontinentálnej Európe a teda naše vzťahy sa definovali a definujú spolu s ChemPubSoc. Je pochopiteľné, že v slobodnom svete



Obr. 2. Mapa ChemPubSoc krajín

nikto nemôže a teda ani nechce diktovať nikomu, kde má publikovať svoje práce a toto rozhodnutie vždy ostane na samotnom autorovi. Na ilustráciu je ukázaná na Obrázku 3 publikačná aktivita Slovenska v chemických vedách, kde ročne vygenerujeme približne 400 článkov ročne.

Avšak z pohľadu SCHS je náš postoj jasný a súvisí so spomínaným úspechom i záväzkom. Podporou ChemPubSoc vyjadrujeme aj istú publikačnú loajalitu, kedy by sme radi vyzvali chemickú komunitu na Slovensku a najmä našich členov SCHS, aby SILNE zvážili publikovanie svojich kvalitných prác v časopisoch ChemPubSoc. A ja sa pokúsim zhrnúť kľúčové dôvody prečo tak urobiť.

1. Časopisy ChemPubSoc majú jedni z najvyšších impakt faktorov, čo svedčí o ich kvalite a záruke, že publikujete v kvalitných časopisoch.
2. Publikovaním v časopisoch ChemPubSoc podporujete kontinentálnu komunitu chemikov.
3. Podporou Európskej chemickej komunity podporujete aj seba, napríklad z pohľadu financovania Európskej vedy.
4. Publikovaním v časopisoch ChemPubSoc podporujete aj SCHS, ktorá je súčasťou ChemPubSoc.
5. Podporou SCHS podporujete aj seba, keďže ak sa SCHS etabluje na úrovni ChemPubSoc, SCHS môže pomôcť sa etablovať Vám, povedzme do komisí EuChemS alebo do redakčných rád časopisov ChemPubSoc.
6. V neposlednej rade, publikovaním v časopisoch ChemPubSoc ekonomicky podporíte ChemPubSoc, proporčne tomu aj SCHS, ktorá tak môže ďalej zvyšovať kvalitu svojich akcií, ako je napríklad Zjazd chemikov v Tatrách.

Verím, že sa mi podarilo načrtnúť rámec činnosti ChemPubSoc, rovnako tak i úlohu SCHS v ňom, a predložiť pádne argumenty, aby ste zvážili publikovanie Vašich špičkových prác práve v naozaj Vašich časopisoch ChemPubSoc. Na

Obr. 4. Predstavitelia ChemPubSoc Europe, CPSE

záver je Obrázok 4, ktorí predstavuje európskych zástupcov v ChemPubSoc, ktorí robia maximum, aby európska chémia ostala svetovou. V každom prípade Vám prajem zaujímavé čítanie stránok časopisov ChemPubSoc a to aj pomocou najnovších internetových služieb na

http://www.chemistryviews.org/

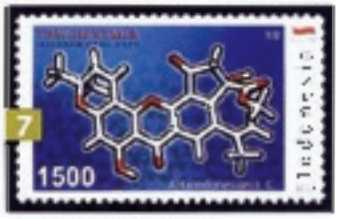
D. Velič

ChemistryViews

2011: A Stamp Odyssey

by Daniel Rabinovich

A myriad of events took place in 2011 to celebrate the International Year of Chemistry (IYC), including thematic conferences, special exhibitions, worldwide experiments, public demonstrations, and many other outreach activities. The achievements of chemistry and its contributions to the well-being of humankind were featured in dozens of magazine articles, newspaper reports, and YouTube videos. It was also an eventful year for chemical philatelists since more than 20 countries, proud perhaps of their industrial or academic heritage, deemed appropriate to release commemorative postage stamps that underscored the value and importance of chemistry to society. This article highlights a selection of those chemistry-related stamps and provides an overview of the "IYC Postage Stamp Central" web page (www.chemistry2011.org/participate/activities/show?id=533) an IUPAC activity that strives (and continues) to keep chemical educators and stamp enthusiasts informed about this subject.


7
1500

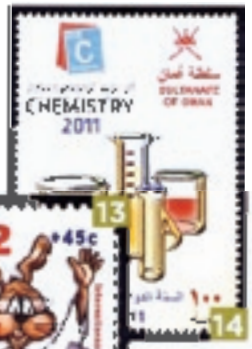
9
60

8
C
IYC 2011
CHEMISTRY
2500

10

12
CANADA

ROMANIA
11


CHEMISTRY
2011
13
14

112
+45c
CURAÇAO

Jozef Tatiersky:

Základné chemické výpočty

Univerzita Komenského v Bratislave, 2011, 216 strán
ISBN 978-80-223-2980-4

Táto vysokoškolská učebnica bola zaradená medzi pedagogické aktivity Slovenskej chemickej spoločnosti pri SAV v Medzinárodnom roku chémie 2011, ktorý bol vyhlásený Organizáciou Spojených národov pre vzdelávanie vedu a kultúru (UNESCO) a Medzinárodnou úniou pre čistú a aplikovanú chémiu (IUPAC).

Predmetom recenzovaného diela sú základné chemické výpočty, ktoré nepochybne predstavujú tú časť základného vzdelania chemika, bez ktorého je jeho zmysluplný pohyb v chemickom laboratóriu úplne nepredstaviteľný. Navyše, základné chemické výpočty reprezentujú prienik troch základných prírodovedných disciplín – chémie, fyziky a matematiky a nevyhnutne zasahujú aj do ďalších disciplín: biológie, geológie, farmácie, environmentalistiky, chemickej technológie a medicíny.

Autorovi sa podarilo využiť svoje mnohoročné skúsenosti vysokoškolského učiteľa a vytvoril modernú, starostlivo premyslenú a dôkladne prepracovanú učebnicu pre študentov bakalárskeho stupňa štúdia v odboroch chémia, biochémia a učiteľstvo chémie v kombinácii s iným predmetom.

Recenzované dielo určite poslúži aj mnohým stredoškolským učiteľom chémie a pracovníkom v laboratóriách základného a aplikovaného chemického, farmaceutického, medicínskeho a technologického výskumu, ktorí sú už s odstupom času nie sú celkom istí ako sú napríklad definované veličiny vyjadrujúce zloženie roztokov: zlomky (hmotnostný, objemový, mólový), koncentrácie (hmotnostná, objemová, látkového množstva, počtu častíc) a ďalšie (molalita, rozpustnosť), príp. nevhodné, ale široko používané jednotky: promile (‰), ppm, ppb, ppt.

Je priam symbolické, že publikácia RNDr. Jozefa Tatierskeho, PhD. sa dostáva na trh nielen v Medzinárodnom roku chémie (2011), ale aj pol storočia od oficiálneho prijatia Medzinárodnej sústavy jednotiek, známej ako SI, ktorú zatiaľ plne nezaviedli len tri štáty našej planéty (USA, Libéria a Mjanmarsko – predtým Barma). Učebnica je napísaná jasným a dobre zrozumiteľným štýlom, postupne buduje myšlienkový systém od najjednoduchších pojmov, zákonov a pravidiel až po ich relatívne náročnú aplikáciu v zložitejších príkladoch. K rýchlejšiemu pochopeniu problematiky základných chemických výpočtov prispieva pekná grafická úprava textu a názornosť obrázkov, vzorcov a schém. Zrozumiteľnosť textu zvyšuje tiež skutočnosť, že každá zo 14 kapitol je samostatným celkom. Za zvlášť prínosné považuje recenzent (z hľadiska svojej 42-ročnej praxe vysokoškolského učiteľa) podkapitoly:
1.3.2.1 Zaokrúhľovanie výsledkov chemických výpočtov
3.2.3.4 Elektrónové štruktúrne vzorce
5.2 Vodné roztoky bezvodých solí a ich hydrátov
7.2 Výpočty na organické syntézy podľa reakčných schém
ako aj tabuľkovú prílohu na s. 201 – 205.

Za pozitívnu možno považovať skutočnosť, že učebnica prináša vo svojej poslednej kapitole bibliografické odkazy na učebnice z problematiky chemických výpočtov, ktoré vyšli v slovenskom jazyku v poslednom polstoročí. Za zmienku stojí aj poznatok, že recenzent prepočítal 100 náhodne vybraných príkladov z posudzovanej učebnice, a nenašiel v nich ani jednu chybu. V dnešnej dobe preferujúcej rýchlo dosiahnuteľné úspechy (aj za cenu značnej nedôslednosti až povrchnosti), sa autorovi podarilo vytvoriť až ojedinele ukážkovú učebnú pomôcku.

S pokojným svedomím možno odporúčať toto dielo ako vhodný zdroj informácií aj študentom magisterského stupňa štúdia a tiež ako príručku „prvej pomoci“ všetkým profesionálnym chemikom s mnohoročnou laboratórnou praxou, ktorým nechýba záujem o svoje vzdelávanie.

Učebnicu si možno zakúpiť osobne alebo na dobierku za 12,45 € na adrese: Kníhkupectvo Anna Dekýšová, Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, e-mail: annadekysova@zoznam.sk.

V. Fajnor

Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska

Univerzita Komenského v Bratislave, 2011, 216 strán
ISBN 978-80-223-2980-4

Hospodársko-spoločenské súvislosti vývoja chemických technológií a chemického priemyslu, autori: Ľ. Hallon, M. Londák, vydalo Nakladateľstvo STU Bratislava, 2011, 97 s.

História rozvoja chemických vlákien na Slovensku, 7. zväzok, autori: M. Jambrich, V. Milata, M. Revús, M. Uher, vydalo Nakladateľstvo STU Bratislava, 2011, 173 s.

Autori v úvode uvádzajú: V nadväznosti na doterajšie výsledky štúdia dejín chemického priemyslu chceme spracovať vývoj chemického priemyslu na Slovensku, ktorý doteraz v našej literatúre absentuje. Základné dáta z vývoja chemického priemyslu sa s námahou zisťujú a ani najnovšie encyklopédie tu nemôžu splniť úlohu podobnej práce.

Vlasný vývoj chémie podnecovalo viacero faktorov. Hľadanie nových látok a surovín, skúmanie ich zloženia, poznávanie kvality prírodných látok bol hnací motor napredovania a vlastného bádania chémie. Dlhé obdobie hromadenia poznatkov a faktografického materiálu umožňovala experimentálna metóda, ktorá je nakoniec aj dnes základným prostriedkom rozvoja chémie. Len pomocou experimentov sa objavovali nové látky, ktoré mali v konečnom dôsledku slúžiť človeku a celému ľudstvu.

Len poznaním minulosti môžeme chápať prítomnosť a predvídať budúcnosť vedy, v našom prípade rozvoja chémie a chemického priemyslu. Predkladaná štúdia je vyústenie snáh celej rady odborníkov – pamätníkov, ktorí sa snažili pokiaľ možno objektívne popísať dejinné súvislosti. Týmito publikáciami autori chceli mnohé vysvetliť a mnohé pripomenúť a uvedomujú si úsilie vynaložené na zhromažďovanie pôvodných prameňov, ich spracovanie a hodnotenie nie je vždy dostatočné.

V súčasnosti sa v chemickom priemysle vytráca nadväznosť na minulé technológie a výroby. Technická práca jednotlivcov sa stráca uprostred veľkých pracovných tímov. Postupne sa bude spracovávať 14 odborov ako aj organizácie (výskumné inštitúcie, výskumné organizácie, vysoké školy), ktorých činnosť podmieňovala rozvoj chemického priemyslu na Slovensku. V predhovore k pilotnému zväzku je uvedené nasledovné motto: „Nežijeme pre minulosť, ale ani na ňu nezabúdame“.

Autori

Chemické horizonty – jarný cyklus 2012

Tradičný prednáškový cyklus Chemické horizonty, pokračoval v popularizácii chemického výskumu širšej verejnosti aj v roku 2012. Prvou prednáškou jarného cyklu bola prvého februára prednáška ***doc. Ing. Ernesta Beinrohra, PhD.*** z Ústavu analytickej chémie FCHPT STU v Bratislave s názvom ***Elektrochémia v atómovej spektroskopii***. SCHS ju spoluorganizovala so Slovenskou spektroskopickou spoločnosťou. Doc. Beinrohr v úvode načrtol históriu atómovej spektroskopie, ktorá sa pretransformovala od objavov Galvaniho a Faradaya do prvého prístroja. Ten zostavil A. Walsh, ním zostavený jednoduchý prístroj testoval roztoky kovových solí vstrekované do nízkoteplotného plameňa. Kľúčom k úspešnej atómovej absorpcii bolo použitie špeciálneho druhu atómového spektrálneho zdroja svetla spolu s monochromátorom. Zosumarizoval výhody a nevýhody atómovej spektroskopie. Metódy atómovej spektroskopie sa vyznačujú vynikajúcou selektivitou i citlivosťou, a preto sú v súčasnosti v oblasti stanovenia kovov, polokovov a niektorých nekovov takmer už automatickou voľbou. Výrazne k tomu napomáha aj všeobecná dostupnosť príslušnej meracej techniky ale aj zvládnuté a dokumentované aplikácie takmer na všetky typy vzoriek a napokon aj snaha výrobcov prístrojov vytvoriť dojem, že ich prístroje dokážu všetko aj bez väčších nárokov na vedomosti a skúsenosti obsluhy. Mohlo by sa zdať, že v oblasti atómovej spektroskopie sa už prakticky nedá nič nové objaviť. Príroda však vie pripraviť rôzne prekvapenia, v prípade atómovej spektrometrie hlavne vo forme rôznych neočakávaných interferencií spôsobené matricou vzorky a nemerateľne nízkych koncentrácií. V takých prípadoch môže pomôcť elektrochémia, ktorá dokáže eliminovať viaceré rušivé vplyvy spôsobené hlavne vysokým obsahom solí a iných elektrolytov vo vzorke a so svojim synergickým účinkom zvyšovať aj dôkazuschopnosť spektroskopických metód. Doc. Beinrohr v ďalšej časti prezentoval princípy a hlavné oblasti aplikácií takýchto kombinovaných techník ako procesná analytika, alebo screening.

Foto 1. Doc. Ing. Ernest Beinrohr, PhD., pri prednáške

Foto 2. Ing. Mária Mastihubová, PhD., pri prezentácii najnovších trendov Biokatalýzy v glykochémii

Foto 3. Prof. Herber Ipser predniesol najnovšie trendy vo výskume bezolovnaných spájok

V marci sme pokračovali prednáškou ***Ing. Márie Mastihubovej, PhD.***, ktorá pracuje ako samostatná vedecká pracovníčka na Chemickom ústave SAV v Bratislave. Na tomto pracovisku sa preorientovala na chémiu a biochémiu sacharidov. V súčastnosti sa snaží zavádzať do organickej chémie, hlavne chémie sacharidov, selektívne enzýmové metódy syntézy a hľadať lacné enzýmové preparáty so syntetickým potenciálom. Optimalizované postupy sú potom aplikované v príprave bioaktívnych prírodných látok, detekčných substrátov, príp. inhibítorov enzýmov a nových materiálov. Preto aj jej prednáška mala názov ***Biokatalýza v glykochémii***. V úvode sme sa dozvedeli fakty z histórie biokatalýzy, interdisciplinárnej vedy založenej na biotechnológii a katalýze a prínosu biokatalýzy do organickej syntézy z hľadiska chemo-, regio- a stereoselektivity. Metódy biokatalýzy a biotransformácií sa v posledných rokoch stávajú bežnými syntetickými nástrojmi organického chemika. Viaceré predsudky voči používaniu biokatalyzátorov v organickom prostredí boli prekonané hlavne vďaka ich vynikajúcej selektivite a vývoju metód zvyšujúcich ich stabilitu v organických reakciách. V ďalšej časti Ing. M. Mastihubová predstavila niekoľko konkrétnych príkladov využitia biokatalýzy v syntetických metódach modernej glykochémie. Bližšie rozobrala enzýmovú regioselektívnu funkcionalizáciu sacharidov, trendy v enzýmovej regioselektívnej protekcii a deprotekcii monosacharidov, enzýmové transglykozylačné reakcie a ďalšie príklady z vlastného výskumu, ktorými sú aj príklady zefektívnenia viacstupňových syntéz cielených produktov aplikáciou biokatalyzátorov v reakciách.

Aprílové Horizonty privítali v prednáškovej miestnosti Amos na PRIF UK v Bratislave vzácneho hosťa z neďalekej Viedne. Bol ním ***prof. Herbert Ipser***, vedúci Oddelenia anorganickej a materiálovej chémie a zároveň predseda Rakúskej chemickej spoločnosti. Jeho prednáška mala názov ***Bezolovnaté spájkovanie, príspevky materiálových chemikov***. Vzhľadom na právne predpisy v mnohých častiach sveta, olovo a iné toxické látky by mali byť odstránené z elektronických zariadení. Príslušná smernica nadobudla účinnosť v Európskej únii v roku 2006. V dôsledku toho, že tradičné spájky na báze cínu a olova musia byť nahradené bezolovnatými materiálmi, ktoré by mali mať v ideálnom prípade podobné, alebo lepšie vlastnosti než olovo a cín. Prof. Ipser v prednáške uviedol niekoľko príkladov z vlastného výskumu o možných nových bezolovnatých spájkovacích materiáloch a predstavil aj metódy na zisťovanie vlastností týchto materiálov. Jedným z príkladov bola experimentálna štúdia, ktorá bola vykonaná s cieľom pochopiť interakciu spájky pripravenej z cínu, striebra a medi s niklovým substrátom. Druhým príkladom bola štúdia ternárneho systému cín-antimón-nikel, vrátane pokusu o prípravu nano-spájky s nižším bodom topenia. Tento výskum je aj súčasťou projektu COST, ktorý prof. Ipser a jeho tím riešia.

O mimoriadnych Chemických horizontoch v júni sa dočítate v samostatnom článku.

Pripravujeme už aj jesenný cyklus Chemických horizontov 2012, kde chceme prezentovať zaujímavé témy z chemických pracovísk. Spoločne s Národným centrom pre popularizáciu vedy a techniky plánujeme zorganizovať v rámci Chemických horizontov prednášku prof. Jána Turňu. Táto prednáška je naplánovaná na druhú októbrovú stredu. V novembri chystáme dve akcie, tradične prednášku v Týždni vedy a techniky, ktorý sa bude konať v dňoch 5.-10.11.2012. SCHS sa bude podieľať aj na organizovaní prednášky prof. Paula De Bievre, s názvom Chemické meranie v 21. storočí, ktorú plánujeme na 21. 11. 2012. Hlavným organizátorom je Ústav analytickej chémie FCHPT, ďalší spoluorganizátori Národný komitét IUPAC a EURACHEM Slovakia. V decembri ukončíme jesenný cyklus horizontov prednáškou prof. Čižmárika o propolise, ktorý je účinnýn pomocníkom na zvýšenie imunity a má aj mnoho ďalších liečebných účinkov.

Veríme, že letná prestávka neodradí záujemcov o prednášky Chemických horizontov, naopak veríme, že záujem na jeseň bude ešte väčší ako doposiaľ.

M. Omastová

How to Predict Theoretical Quantitative Thermokinetic Parameters? Application to Halogenated Systems of Atmospheric Interest

Atmospheric chemistry of halocarbons is important for several reasons. Halogens and their compounds affect the oxidizing capacity of the atmosphere, enter the ozone cycle, and (in the case of iodine) may serve as initial structures in aerosols formation, thus influencing the cloud condensation nuclei. Two groups of researchers, from Slovakia and from France, joined to study systematically atmospheric chemistry of halocarbons. Prof. F. Louis and Dr. S. Canneaux (University Lille 1) visited Prof. I. Černušák (Comenius University) in June to present their common results the „Chemical Horizons“ series of lectures organized by Slovak Chemical Society.

The abstraction of hydrogen atoms by hydroxyl radicals is the determining factor in the tropospheric lifetimes of most saturated organic compounds, including halogenated species containing one or more C-H bonds. In describing the energetics and kinetics of halocarbons in the atmosphere, the use of efficient and reliable computational chemistry tools can be very helpful, not only to shed some light in the observed reactivity trends but also in the prediction of thermokinetic data for which no experimental data are available.

Na ľavej strane Prof. Ivan Černušák, v strede Prof. Florent Louis, napravo Dr. Sebastien Canneaux.

The aim is to provide the computational recipe that can be used on a routine basis by both experimentalists and theoreticians to obtain a reliable quantitative picture of the kinetics. This implies to choose the computational scheme including all necessary corrections to molecular energies (basis set saturation, valence and core-valence electron correlation, scalar relativistic effects, spin-orbit coupling, spin-adaptation, vibration and tunnelling corrections). In the lecture presented by Prof. F. Louis, it was emphasized how to address and solve the different problems that can be encountered in the prediction of rate constants. The cooperation between University Lille 1 and Comenius University in Bratislava resulted in a series of papers with valuable predictions of the rate constants, reaction energies and heats of formation of the species not easily amenable to experiment.

I. Černušák, F. Louis

Konferencie

Odborný garant: prof. RNDr. Nadežda Števulová, PhD.
SvF TU v Košiciach

Vedecký výbor:

prof. Ing. Marián Peciar, PhD. - *SjF STU v Bratislave*
prof. Ing. Mikuláš Šveda, PhD. - *SvF STU v Bratislave*
prof. Ing. Ján Tomáš, CSc. - *FBP SPU Nitra*
prof. Ing. Jiří Zegzulka, CSc. - *FS VŠB TU Ostrava*
doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD. - *SvF TU v Košiciach*
doc. RNDr. Adriana Eštoková, PhD. - *SvF TU v Košiciach*
doc. Ing. Alena Sičáková, PhD. – *SvF TU v Košiciach*
doc. RNDr. Jaroslav Briančin, PhD. - *Úgt SAV Košice*
doc. Ing. Karol Jesenák, PhD. - *PF UK v Bratislave*
doc. RNDr. Mária Reháková, PhD. - *PF UPJŠ v Košiciach*
doc. Ing. Tomáš Svěrák, PhD. - *FCh VUT Brno*
doc. Ing. Petra Šulcová, PhD. - *FCHT UP v Pardubiciach*
RNDr. Gabriel Szabó, CSc. - *SHMÚ Košice*
Ing. Matej Špak, PhD. – *BetónRacio, s.r.o.*
Ing. Július Strigáč, PhD. - *Považská cementáreň, a.s.*

Organizačný garant: doc. RNDr. Adriana Eštoková, PhD.
SvF TU v Košiciach

Organizačný výbor: Ing. Marcela Ondová, PhD.
Ing. Jozef Junák, PhD.
Ing. Lenka Palaščáková
Ing. Júlia Čigášová
Ing. Eva Singovszká

Kontaktná adresa: Ing. Lenka Palaščáková
Ústav environmentálneho inžinierstva
Stavebná fakulta TU v Košiciach
Vysokoškolská 4
042 00 KOŠICE
SLOVENSKO

tel.: + 421 55 602 4265
e-mail: partikularne.latky@gmail.com

TECHNICKÁ UNIVERZITA V KOŠICIACH
STAVEBNÁ FAKULTA
ÚSTAV ENVIRONMENTÁLNEHO INŽINIERSTVA
SLOVENSKÁ CHEMICKÁ SPOLOČNOSŤ
Odborná skupina
CHÉMIA TUHÝCH LÁTOK A MECHANOCHÉMIA

dovoľujú si Vás pozvať na

VII. konferenciu s medzinárodnou účasťou

13. - 14. november 2012

Herľany pri Košiciach
Učebno-výcvikové zariadenie TU v Košiciach

XII. konferencia s medzinárodnou účasťou SÚČASNÝ STAV A PERSPEKTÍVY ANALYTICKEJ CHÉMIE V PRAXI ACP 2012

V dňoch 8. - 11. mája 2012 úspešne prebehol v priestoroch Ústavu vzdelávania a služieb v Bratislave na Kramároch XII. ročník konferencie s medzinárodnou účasťou „SÚČASNÝ STAV A PERSPEKTÍVY ANALYTICKEJ CHÉMIE V PRAXI“. Organizátorom konferencie bol Ústav analytickej chémie Fakulty chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave v spolupráci s Katedrou analytické chemie, Přírodovědecké fakulty UK v Prahe, Slovenskou zdravotníckou univerzitou v Bratislave, Odbornou skupinou pre analytickú chémiu Slovenskej

chemickej spoločnosti a České společnosti chemické.

Konferencie sa zúčastnilo 117 účastníkov, z toho 22 zo zahraničia, prevažne z Čiech, Srbska, Ukrajiny a Rumunska. V rámci vedeckého programu vystúpilo 49 účastníkov s prednáškou, ďalších 51 účastníkov prispelo do programu príspevkom posterovou formou. Vedecký odborný program konferencie ACP 2012 v sekciách Kvalita skúšok, Klinická analýza, Potravinárska analýza, Environmentálna analýza, Vývoj metód, a Analýza v chémii bol venovaný vývoju a aplikácii moderných metód analytickej chémie a chemickej analýzy v priemyselnej a skúšobníckej praxi, smerovaniu vývoja v oblastiach analytickej kontroly, zabezpečenia kvality a informačnej obsažnosti analytických výsledkov.

Významným prínosom podujatia bol priestor na výmenu informácií a komunikáciu medzi pracovníkmi z akademického prostredia a účastníkmi priamo z analytickej praxe. Podujatie bolo akreditované Slovenskou akreditačnou radou pre kontinuálne medicínske vzdelávanie a prispelo k zvyšovaniu kvalifikácie pracovníkov skúšobných a akreditovaných laboratórií. Vedecké príspevky sú publikované v konferenčnom elektronickom vydaní časopisu Chemické listy v suplementárnom čísle. Konferenciu sponzorsky podporovalo 20 firemných partnerov, ktorí jednak prispeli odborným vystúpením priamo v programe prednášok, jednak formou výstavky prezentovali svoje portfóliá a demonštrovali najnovšiu analytickú inštrumentáciu. Zástupcovia firiem boli k dispozícii účastníkom konferencie, pomohli im zorientovať sa v technických novinkách svetových firiem vyvíjajúcich analytickú inštrumentáciu a inšpirovali ich k modernizácii experimentálneho vybavenia laboratórií.

Príjemným bodom konferencie bol spoločenský večer v hoteli Matyšák s úžasným menu, spestrený ochutnávkou kvalitných vín v originálnej vínnej pivnici. Večer bol priestorom na neformálne aj pracovné diskusie s nadviazaním nových a utužením už existujúcich priateľských kontaktov medzi analytikmi. Účastníci dôstojne reprezentovali svoje pracoviská a kvalitou prezentácií

rozhodujúcim spôsobom prispeli k ďalšiemu úspešnému rozvoju analytickej chémie na Slovensku a utuženiu blízkej spolupráce medzi analytickými pracoviskami v blízkych okolitých krajinách. Autori príspevku by sa radi srdečne poďakovali všetkým účastníkom ako aj sponzorom za podporu podujatia a perfektné prezentácie, spoluorganizátorom akcie za to, že významnou mierou prispeli k úspešnému priebehu konferencie ACP 2012.

Tešíme sa, že i tohtoročná konferencia bola zaujímavá a príjemná ako predchádzajúce ročníky a podarilo sa nám udržať vysokú odbornú úroveň a aj priateľský nádych konferencie ako tomu bolo po minulé ročníky. Konferencia ACP 2012 sa vďaka vysokej kvalite zaradila k významným akciám Odbornej skupiny pre analytickú chémiu SCHS a ČSCH.

J. Labuda, S. Hrouzková

OS Medicínska chémia
Záverečná konferencia projektu COST CM0602 – Inhibítory angiogenézy: dizajn, syntéza a aplikácia v biológii (ANGIOKEM) Smolenice 11. – 14. jún 2011

Finálna konferencia projektu COST CM0602, venovaná výskumu inhibítorov angiogenézy, sa konala v krajine, výskumníci ktorej ako prví reagovali na výzvu "Call FP6-2005-LIFESCIHEALTH-7" v novembri 2005. Autori pripravili návrh projektu na horeuvedenú tému. V roku 2005, medicínsko chemický výskum v tejto oblasti v Európe bol na rozdiel od USA skôr výnimočný. Autori prezentovali vedecký zámer na stretnutí v Prahe v marci 2006, kde sa zúčastnili konferencie v rámci iného COST projektu D28/008/03. Návrh projektu Angiokem bol podaný v septembri 2006 a grant bol udelený CSO *(Committee of Senior Officials)* 20. novembra 2006.[1] Na prvom stretnutí v Bruseli v júni 2007 si účastníci zvolili predsedu (Chair – prof. Daniele Passarella z Milána),[2] podpredsedu COST projektu (vice chair – doc. Martu Sališovú z PRIF UK) a vedúcich pracovných skupín. Na stretnutí diskutovali o vedeckých zámeroch a organizácii projektu (pozri článok: M. Sališová, A. Boháč a D. Passarella: „Chémia a biológia vo výskume inhibítorov novotvorby ciev – cesta k novej terapii nádorov", ChemZi 2009, 5/9, 8-9). V štruktúre projektu sa vytvorili štyri pracovné skupiny:

a/ WG1 - *Angiogenic Intercellular Communication Inhibition* (Chair: J. Borlak, R. Sanyal)

b/ WG2 - *Endothelial Cells Activation Inhibition* (Chair: A. Boháč)

c/ WG3 - *In Silico Designing of Angiogenic Inhibitors* (Chair: A. Goldblum)

d/ WG4 - *Medicinal Chemistry and Bioassays in Angiogenic Inhibition* (Chair: S. Freeman, D. Kikelj)

V priebehu 4 rokov sa účastníci CM0602 stretávali pravidelne dvakrát do roka a k zakladajúcim členom sa postupne pridávali kolegovia z univerzít a firiem z ďalších krajín. Projekt nakoniec združil 42 chemických a biologických výskumných skupín z 21 EU a EU pridružených krajín a pomohol tak rozšíriť výskum v oblasti inhibície angiogenézy v Európe. Medzinárodná spolupráca okrem iného vyústila do publikačnej činnosti, niekoľkých patentov a založenia troch výskumných firiem. Účastníci

Foto 1 – COST Chair prof. Daniele Passarella v kruhu účastníkov projektu

Foto 2 – účastníci na Smolenickom zámku

projektu mohli využívať metódy, skúsenosti, prístroje a biologické testovanie, ktoré na vlastnom pracovisku nemali. V rámci COST projektu sa stretávali tiež mladí vedeckí pracovníci, doktorandi a študenti, ktorí okrem toho mohli absolvovať aj výskumné, niekoľko mesačné mobility na spolupracujúcich pracoviskách *(Short-Term Scientific Missions)*.

Vybudované pracovné a priateľské vzťahy účastníkov projektu umožnili vytváranie nových vedeckých spoluprác a inšpirovali mladých kolegov pri budovaní interdisciplinárneho výskumu. Výsledky výskumu v danej oblasti sa dostali aj do vzdelávania na univerzitách členov projektu.

Foto 3 – účastníci na lúke pred Smolenickým zámkom

Foto 4 – účastníci na prehliadke Bratislavy

Na finálne stretnutie do Smoleníc prišlo 57 účastníkov (z toho takmer polovica mladých vedeckých pracovníkov) zo 17 EU a EU pridružených krajín a jeden expert z USA. Táto chemicko - biologická konferencia sa konala na Slovensku v roku, ktorý bol vyhlásený za medzinárodný rok chémie (IYC).

Organizátori pripravili dobré podmienky pre oficiálne aj personálne stretnutia, prednášky i posterové prezentácie v príjemnom prostredí Smolenického zámku a jeho blízkeho okolia. Účastníkom konferencie sa páčila aj slovenská pohostinnosť a sprievodné akcie, ochutnávka malokarpatských vín pri cimbalovej muzike, či pripravená prehliadka Bratislavy spojená s návštevou opery.

Veríme, že začatá spolupráca v rámci uvedeného projektu prinesie ďalšie zaujímavé výsledky tak pre chemické, ako aj biologické laboratóriá.

Výsledkom ukončeného COST projektu bolo aj získanie novej COST akcie CM1106, ktorá podobne interdisciplinárne spája chémiu s biológiou a ktorej téma *Chemical Approaches to Targeting Drug Resistance in Cancer Stem Cells* je opäť veľmi aktuálna.

M. Sališová, A. Boháč

[1]http://www.cost.esf.org/domains_actions/cmst/Actions/CM0602

[2]http://www.danielepassarella.org/Home/Home.html

54. Zjazd poľských chemikov

V dňoch 18.-22. septembra sa konal 54. zjazd PTChem (Polskie Towarzystwo Chemiczne) a SITPChem (Stowarzyszenie Inżynierów i Techników Przemyslu Chemicznego) (http://ptchem2011.umcs.lublin.pl/) v roku celosvetových osláv chémie a Márie Skłodowskej-Curie (na tomto poradí priezvísk nástoja naši poľskí kolegovia) práve na univerzite, ktorá nesie jej meno, na Univerzite Márie Curie-Skłodowskej v Lubline. Samotné mesto je symbolom spolužitia poľskej, ruskej a židovskej komunity. Zjazd konajúci sa pod záštitou ministra vedy a vysokého školstva Prof. dr hab. Barbary Kudryckiej otvoril prof. dr hab. Tadeusz Borowiecki. Na slávnostnom otvorení odovzdal vedúci delegácie SCHS prof. V. Milata pamätný list so známkou vydanou na počesť Medzinárodného roku chémie, do poľská strana mimoriadne ocenila. Zaujímavosťou Otváracieho ceremoniálu bolo vysvätenie zrekonštruovanej štandardy PTChem biskupom dr Mieczysławom Cisłom.

Hlavná budova Univerzity Marie Curie-Skłodowskej v Lubline

Prof. V. Milata pri príhovore na Slávnostnom otvorení zjazdu

Zjazd bol spoluorganizovaný 7 lokálnymi autoritami (Polskie Towarzystwo Chemiczne, Wydział Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Stowarzyszenie Inżynierów i Techników Przemysłu Chemicznego, Muzeum Marii Curie-Skłodowskiej, Uniwersytet Medyczny w Lublinie, Uniwersytet Przyrodniczy w Lublinie, Instytut Nawozów Sztucznych w Puławach) a prebehol podľa osvedčenej schémy: 18.9. poobede Valné zhromaždenie a následná spoločná večera a tri a pol dňa rokovaní, z toho 13 plenárnych prednášok zásadne poľských chemikov s výnimkou prednášky prezidentky IUPAC prof. Nicole Moreau: IUPAC and the International Year of Chemistry – what can the chemists do to keep IYC alive after 2011? Rokovanie zjazdu malo svoje ťažisko v 10 sekciách (Anorganická a koordinačná chémia, Analytická chémia a chémia životného prostredia, Fyzikálna a teoretická chémia, Organická chémia, Chémia polymérov, Chemická technológia a katalýza, Kryštalochémia, Rádiochémia a radiačná chémia, Bioorganická, farmaceutická a klinická chémia a Didaktika a história chémie), troch mikrosympóziách (Pokroky v analýze potravín, Katalýza a katalytické procesy v zelenej chémii a Produkty exktrakcii nadkritickej a jej využitie) a tradične Fóra mladých. Počas celého zjazdu prebiehala výstava nespočetných firiem, pobočiek,

Prezident PTChem Prof. dr hab. Bogusław Buszewski so štandardou PTChem

Vysvätenie zrekonštruovanej štandardy PTChem

Prezidentka IUPAC-u prof. Nicole Moreau preberá medailu Márie Skłodowskej-Curie z rúk prezidenta PTChem Prof. dr hab. Bogusława Buszewského

Z panelovej sekcie v priestoroch Univerzity

vydavateľstiev, čo odráža záujem poľských producentov propagovať svoje výsledky na najvyššom stretnutí chemikov a dáva nám nielen vzor, ale aj námet pre zamyslenie sa.

Skorojubilejný, 55. zjazd poľských chemikov a technikov sa bude konať v Białystoku, 16. – 20. septembra 2012 (www.55-zjazd-ptchem.uwb.edu.pl). Ako tradične sa ho zúčastní v zmysle našej vzájomnej dohody delegácia SCHS, ktorej členovia budú aj dvaja mladí chemici vybraní na zasadnutí Výboru SCHS v marci toho roku, ale veríme, že aj ďalší členovia našej spoločnosti – veď poľština je nielen blízkym jazykom, ale Poľsko je obrovskou krajinou v veľkou diverzitou chemického výskumu, čo dokazuje aj počet sekcií. Tešíme sa na stretnutie v Białystoku.

V. Milata

BYPoS 2012

Bratislava Young Polymer Scientists WORKSHOP

1st - 5th October, 2012
Liptovský Ján,
Low Tatras, Slovakia

. . . follow the tradition of regular meetings of young scientist which we started in last few years. BYPOS workshop is oriented on

all fields of macromolecular chemistry

and provides a great possibility for young polymer scientists (students or young researcher up to 40 years) to present and discuss their results and knowledge in the field of polymer chemistry to incorporate to the group of young motivated people.

Scope:

Synthesis, modification and characterization of polymers;
Polymer blends and composites;
Smart polymers and biopolymers;
Polymer stability and degradation;
Physics of polymers (theory, modelling and simulation).

Provisional list of main speakers:

prof. **Luis Cadillon Costa**, University of Aveira, Portugal
prof. **Valeria Harabagiu**, Institute of Macromolecular Chemistry, Romania
prof. **Marek Kowalczuk**, Center of Polymers and Carbon Materials, Poland
Dr. **Igor Krupa**, Polymer Institute SAS, Slovakia
prof. **Robert Liska**, Vienna University of Technology, Austria

Important dates:

Registration ..... **July 31st 2012**
Abstract ..... **August 20th 2012**
Payment ..... **September 1st 2012**

Conference fee:

The registration fee is
ALL INCLUSIVE!!!
And it's only 390 Euro

Auspices:

POLYMER INSTITUTE SAS
CEEPN POLYMER NETWORK

more information about BYPoS 2012 you will find on www.polymer.sav.sk/bypos

HISTÓRIA ROZVOJA GUMÁRENSKEJ VÝROBY NA SLOVENSKU

I. Hudec, G. Kyselá, M. Jambrich, M. Uher, V. Milata, M. Revús

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie ZSVTS Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, rosamichal@zoznam.sk

Gumárenský priemysel je výrobné odvetvie chemického priemyslu, ktoré má viac ako storočnú tradíciu. Prvé výrobky boli založené na využití prírodného kaučuku, ktoré boli pre nevhodné tepelné vlastnosti tohto materiálu málo využívané.

Objavenie vulkanizácie kaučuku umožnilo pomerne rýchly rozvoj ďalších gumárenských výrobkov, ktoré sa v súčasnej dobe používajú v doprave, stavebníctve, poľnohospodárstve, v chemickom, strojárskom a potravinárskom priemysle, farmácii, medicíne, v domácnostiach a inde.

V prednáške budeme prezentovať históriu gumérenského priemyslu, ktorá bude obsahom ďalšieho zväzku monografie „Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska".

Okrem vlastného odboru chemického priemyslu sa spracováva aj činnosť organizácií, ktoré podmieňovali rozvoj chemického priemyslu do r. 1990 (výskumné inštitúcie, výrobné organizácie a vysoké školy).

Práca je podporovaná grantom MŠ SR VEGA (2/0109/10) a KEGA 014-013STU-4/2010.

Literatúra:

Jambrich M., Uher M., Milata V., Revús M: História rozvoja vlákien a vláknitých materiálov na Slovensku, vyd. Vydavateľstvo STU, Bratislava 2011 (v tlači).

OPTIMALIZÁCIA DCA-OES METÓDY – VYPAROVANIE A KALIBRÁCIA.

Miroslava Hámborská[1], Silvia Ružičková[1], Vladislava Boková[1], Jozef Borovský[1], Daniel Presuľ[1]

[1]*Katedra chémie Hutníckej fakulty Technickej univerzity v Košiciach, Letná 9, 04200 Košice, miroslava.hamborska@tuke.sk*

Prezentovaný príspevok kompletizuje niektoré výsledky rozsiahlej experimentálnej práce zameranej na optimalizáciu a validáciu priamej (bezrozkladovej) DCA-OES metódy, v minulosti úspešne aplikovanej pri analýze práškových keramických materiálov. Validovaná metóda, využívajúca spektrometer ATOMCOMP – 2000 (Thermo Jarrell Ash), ktorý je vybavený moderným riadeným oblúkovým výbojom jednosmerného prúdu programovateľným v troch stupňoch intenzity prúdu so súčasnou voľbou dĺžky horenia jednotlivých fáz, CID detektorom a echelle mriežkou, bude aplikovaná pre účely environmentálnej analýzy (gravitačný prašný spad, pôdy, sedimenty, biofilmy). Experimenty boli zamerané na sledovanie vplyvu argónovej ochrannej atmosféry a spektrochemických prídavkov (Li_2CO_3, AgCl) na priebeh vyparovania vybraných prvkov (Cd, Cr, Ni, Pb) [1] a štúdium kalibračných možností metódy (mono- a mnohoštandardová kalibrácia) [2]. Na analýzu boli použité modelové vzorky pripravené zmiešaním matrixu a postupne riedenou základnou vzorkou, pričom zloženie matrixu bolo zvolené tak, aby zodpovedalo priemernému zloženiu reálnych vzoriek sedimentov. Vyparovanie bolo vyhodnotené pomocou normovaných vyparovacích kriviek, z ktorých boli odčítavané hodnoty polčasu t50% a času totálneho vyparenia t100% jednotlivých analytov. Pre výpočet parametrov kalibrácie bol použitý štatistický vyhodnocovací softvér QC Expert 2.5™ [3], pričom pre zhodnotenie mono- a mnohoštandardovej kalibrácie boli vybrané validačné parametre ako absolútny člen, štandardná odchýlka, citlivosť, hranica dôkazu (3s - kritérium) a korelačný koeficient.

Poďakovanie: Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore projektu VEGA 1/0685/11.

[1] Presuľ D.: Optimalizácia spektrochemických metód pre analýzu vybraných environmentálnych vzoriek. Diplomová práca. Košice. TUKE (2009)
[2] Borovský J.: Štúdium kalibračných možností DCA-OES metódy pre priamu analýzu tuhých environmentálnych vzoriek. Diplomová práca. Košice. TUKE (2011)
[3] Kupka K.: QC. Expert™ – Statistical software. TroloByte. Pardubice (2002)

MIKROBIÁLNE KULTÚRY V MLIEKARSTVE, VÝZNAM A FUNKCIE

Mária Greifová [1]
[1]*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, maria.greifova@stuba.sk*

Mikrobiálne kultúry sú vybrané živé mikroorganizmy, ktoré sa vo vhodnej forme používajú ako očkovacia dávka v množstve najmenej 106 buniek/g s cieľom zahájiť proces fermentácie, ktorý ma zlepšiť vzhľad, chuť, vôňu a trvanlivosť produktu.

Mikrobiálne kultúry používané v mliekarstve sa rozdeľujú podľa rôznych kritérií. Ich základné funkcie sú:

Štartovacia- je spojená so schopnosťou mikroorganizmov meniť substráty (sacharidy, bielkoviny a lipidy) na metabolity, ktoré ovplyvňujú chuť, vôňu a konzistenciu výrobkov.

Protektívna - súvisí s produkciou antimikrobiálne aktívnych metabolitov, ktoré potláčajú rast nežiaducich mikroorganizmov a mikroorganizmov spôsobujúcich onemocnenie z požívatín.

Probiotická- vyplýva z množstva aktivít chemickej, biochemickej a mikrobiologickej povahy a ich výsledkom je pozítivné pôsobenie na zdravotný stav a kvalitu života ľudí a zvierat.

V minulosti bola známa a najviac žiadaná technologická funkcia, dnes majú svoje významné postavenie aj kultúry s probiotickými a protektívnymi vlastnosťami.

Kyslomliečné baktérie, ktoré sú najviac zastúpené v zakysových kultúrach majú okrem mliekarenskej technológie uplatnenie aj v ďalších odvetviach potravinárskeho priemyslu (v mäsovom, konzervárenskom, pekárenskom, kvasnom) tiež v humánnej a veterinárnej medicíne.

Práca bola podporená projektom APVV 07/0158.

SCHS

Jubilejný 60. zjazd Slovinskej chemickej spoločnosti

Jubilejný 60. zjazd Slovinskej chemickej spoločnosti sa uskutočnil v dňoch 14.-16.9.2011 v hoteli St. Bernardin. v prímorskom letovisku Portorož, známym najmä svojím kasínom po názvom: „Slovenian Chemical Days 2011“. Príjemná prímorská klíma tvorila príjemný rámec tohto podujatia. Slávnostné otvorenie prebehlo bežným spôsobom: uvítací prejav predsedu usporiadajúcej Slovinskej chemickej spoločnosti, ba dá sa povedať takmer jej symbolom prof. Venčeslavom Kaučicom, v ktorom privítal, ocenil zástupcov nemeckej, rakúskej a slovenskej chemickej spoločnosti pozdravným **diplomom/listom.** Takýto SCHS dostala aj pred 10 rokmi a dokumentuje to veľmi dobré vzťahy medzi našimi spoločnosťami, ktoré by bolo dobré zvýrazniť aj zintenzívnením spolupráce. Pri tejto príležitosti sme usporiadateľom odovzdali Pamätný list s našou známkou vydanou pri príležitosti Medzinárodného roku chémie a vzoriek bieleho a červeného vína. Ich zmiešaním by sme dokázali vytvoriť ružové víno, rosé, ale ako sme uviedli, taký krásny prístav ako je Portorož = Portorose nemáme. Plénum túto poznámku prijalo so zjavným pobavením a otvorenie bolo ukončené kultúrnym programom. Zástupcovia maďarskej a poľskej spoločnosti pozdravili účastníkov až pri slávnostnej večeri po vedeckom programe prvého dňa. Zo Slovenska sa zjazdu zúčastnili aj kolegovia z UCM Trnava.

V. Milata

Slávnostné otvorenie jubilejného 60. zjazdu Slovinskej chemickej spoločnosti (sprava: sekretár GDCh prof. Koch, prezident GÖCh prof. Ipser, prof. Sydnes, prezident V. Kaučic, predseda EUCheMS prof. Schubert a d.)

Prof. Venčeslav Kaučic pri slávnostnom otvorení zjazdu.

FCHPT

Najlepšia technická fakulta na Slovensku

Vychováva kvalitných odborníkov pre celé spektrum chemického, potravinárskeho, farmaceutického a kozmetického priemyslu, ako aj v mnohých oblastiach záchrany objektov kultúrneho dedičstva a životného prostredia. Atraktivita štúdia je aj v možnosti podieľať sa na interdisciplinárnych projektoch, kde chémia zasahuje do fyzikálnych, biologických a medicínskych vied, aj preto majú naši absolventi také široké možnosti uplatnenia doma aj v zahraničí.

O kvalite a potrebe našich absolventoch svedčí aj minimálna nezamestnanosť, pričom fakulta pomáha najlepším študentom pri naštartovaní ich kariéry. Fakulta poskytuje vzdelanie v piatich bakalárskych, jedenástich inžinierskych a šestnástich doktorandských študijných programoch.

Akreditované študijné programy bakalárskeho štúdia:

Automatizácia, informatizácia a manažment v chémii a potravinárstve
Biotechnológia a potravinárska technológia
Chémia, medicínska chémia a chemické materiály
Chemické inžinierstvo
Výživa, kozmetika a ochrana zdravia

Všetci uchádzači, ktorí majú ukončené stredoškolské vzdelanie s maturitou, budú prijatí bez prijímacích pohovorov.

Absolvent bakalárskeho štúdia získa titul bakalár (Bc.) a môže odísť do praxe, prípadne sa prihlásiť na druhý stupeň - inžinierske štúdium, ktoré trvá dva roky. Absolvent získa titul inžinier (Ing.).

Podrobnejšie informácie o náplni jednotlivých študijných programov a profile absolventa nájdete na www.fchpt.stuba.sk.

V prvom kole sa prihlášky prijímajú do 30. apríla 2012.

V druhom kole sa prihlášky prijímajú do 18. augusta 2012 už iba na vybrané študijné programy. Konkrétne podmienky budú uverejnené v masmédiách a na stránke fakulty: www.fchpt.stuba.sk.

S vytlačenou elektronickou prihláškou je potrebné zaslať vysvedčenia zo strednej školy, maturitné vysvedčenie (overené kópie), životopis, potvrdenie od lekára a kópiu potvrdenia o zaplatení manipulačného poplatku 20 EUR na účet Štátna pokladnica Bratislava, číslo účtu: 7000081471/8180, variabilný symbol: 2012, správa pre adresáta: PK2012.

prof. Ing. Ján Šajbidor, DrSc. dekan fakulty

STU FCHPT
SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLÓGIE

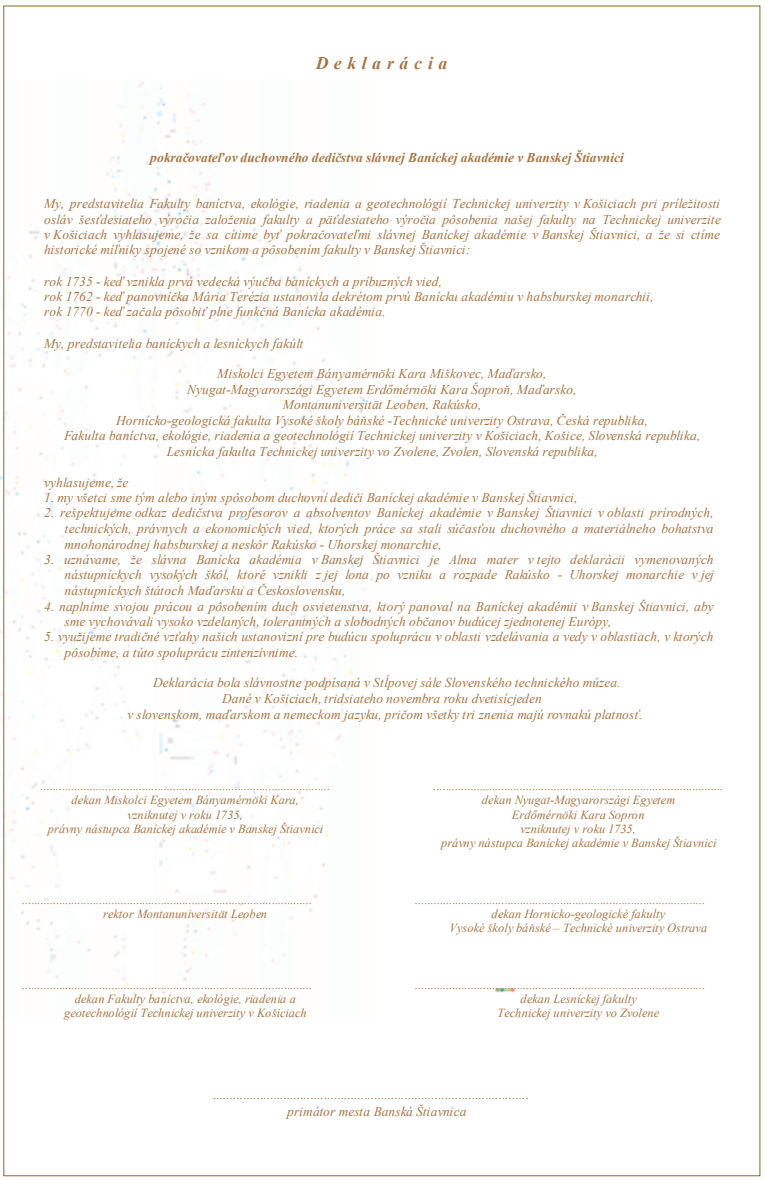
European Congress? European Society? … and the First Institute of Technology since 1762

Dušan Velič
Slovak Chemical Society and Associated Universities, see the Memorandum (Deklarácia)
Radlinskeho 9, 812 15 Bratislava, Slovakia

The town of Banska Stiavnica (Banská Štiavnica in Slovak, Schemnitz in German, Selmecbánya in Hungarian) was in Middle Ages the main producer of silver and gold in the Kingdom of Hungary, a part of Austrian-Hungarien Monarchy, nowadays Slovakia. The place was called "terra banensium" (the land of miners) as early as in 1156 and gained the status of a royal town in 1238. The town Banska Stiavnica was a foremost center of innovation in mining industry, in 1627 gun powder was used here for the first time in a mine and water reservoirs and channels, known as tajchy, were designed to drain water from the flooded mines and also to provide energy for the early industrialization. In 1735, the first mining school in the Kingdom of Hungary was founded there and in 1762 the Hofkammer in Vienna, with support from Queen Maria Theresa, transformed the school into the famous Mining Academy, establishing the first institute of technology or the first technical university in the world. Department of chemistry and mineralogy was formed as the very first one and his head was Nicolaus Jacquin from Leyden, who joined theory with practice and lectures were based on his own laboratory experiments. The school organized in 1786 in Sklene Teplice also the First International Scientific Congress, where even Lavoisier participated, who considered Jacquin as the founder of experimental education in chemistry. At this meeting, the first International Society „La Société de l Exploration des Mines" was also established. The most prestigious credit was given to the Mining Academy by Fourcroy in French National Convent in 1794, appreciating laboratory experiments in chemistry education. The Mining Academy in Banská Štiavnica became an example for establishing Parisien Polytechnique and other polytechnics in Europe and today we are celebrating 250 years of this tradition.

Lecture Award nominations 2012

- **Prof. Nazario Marin**
Nominated by the Royal Society of Chemistry of Spain
Suggested venue for lecture: Any EuCheMS conference of symposium related to organic chemistry
- **Dr. Dušan Velic**
Nominated by the Slovak Chemical Society
Suggested venue for lecture: 4th EuCheMS congress, Prague
- **Prof. Kari Rissanen**
Nominated by the Finish Chemical Societies
Suggested venue for lecture: 4th EuCheMS congress, Prague
- **Prof. David Milstein**
Nominated by the Israel Chemical Society
Suggested venue for lecture: EuCheMS congress
- **Dr. John Brown**
Nominated by the President of the RSC Organic Chemistry Division Dr David Rees



D e k l a r á c i a

pokračovateľov duchovného dedičstva slávnej Banickej akadémie v Banskej Štiavnici

My, predstavitelia Fakulty banictva, ekológie, riadenia a geotechnológií Technickej univerzity v Košiciach pri príležitosti osláv šesťdesiateho výročia založenia fakulty a päťdesiateho výročia pôsobenia našej fakulty na Technickej univerzite v Košiciach vyhlasujeme, že sa cítime byť pokračovateľmi slávnej Banickej akadémie v Banskej Štiavnici, a že si ctíme historické míľniky spojené so vznikom a pôsobením fakulty v Banskej Štiavnici:

rok 1735 - keď vznikla prvá vedecká výučba banických a príbuzných vied,
rok 1762 - keď panovníčka Mária Terézia ustanovila dekrétom prvú Banícku akadémiu v habsburskej monarchii,
rok 1770 - keď začala pôsobiť plne funkčná Banícka akadémia.

My, predstavitelia banických a lesníckych fakúlt

Miskolci Egyetem Bányamérnöki Kara Miškovec, Maďarsko,
Nyugat-Magyarországi Egyetem Erdőmérnöki Kara Šoproň, Maďarsko,
Montanuniversität Leoben, Rakúsko,
Hornícko-geologická fakulta Vysoké školy báňské -Technické univerzity Ostrava, Česká republika,
Fakulta banictva, ekológie, riadenia a geotechnológií Technickej univerzity v Košiciach, Košice, Slovenská republika,
Lesnícka fakulta Technickej univerzity vo Zvolene, Zvolen, Slovenská republika,

vyhlasujeme, že
1. my všetci sme tým alebo iným spôsobom duchovní dedičí Banickej akadémie v Banskej Štiavnici,
2. rešpektujeme odkaz dedičstva profesorov a absolventov Banickej akadémie v Banskej Štiavnici v oblasti prírodných, technických, právnych a ekonomických vied, ktorých práce sa stali súčasťou duchovného a materiálneho bohatstva mnohonárodnej habsburskej a neskór Rakúsko - Uhorskej monarchie,
3. uznávame, že slávna Banícka akadémia v Banskej Štiavnici je Alma mater v tejto deklarácii vymenovaných nástupníckych vysokých škôl, ktoré vznikli z jej lona po vzniku a rozpade Rakúsko - Uhorskej monarchie v jej nástupníckych štátoch Maďarsku a Československu,
4. naplníme svojou prácou a pôsobením duch osvietenstva, ktorý panoval na Banickej akadémii v Banskej Štiavnici, aby sme vychovávali vysoko vzdelaných, tolerantných a slobodných občanov budúcej zjednotenej Európy,
5. využijeme tradičné vzťahy našich ustanovizní pre budúcu spoluprácu v oblasti vzdelávania a vedy v oblastiach, v ktorých pôsobíme, a túto spoluprácu zintenzívnime.

Deklarácia bola slávnostne podpísaná v Stĺpovej sále Slovenského technického múzea.
Dané v Košiciach, tridsiateho novembra roku dvetisícjeden
v slovenskom, maďarskom a nemeckom jazyku, pričom všetky tri znenia majú rovnakú platnosť.

dekan Miskolci Egyetem Bányamérnöki Kara, vzniknutej v roku 1735, právny nástupca Banickej akadémie v Banskej Štiavnici

dekan Nyugat-Magyarországi Egyetem Erdőmérnöki Kara Sopron vzniknutej v roku 1735, právny nástupca Banickej akadémie v Banskej Štiavnici

rektor Montanuniversität Leoben

dekan Hornicko-geologické fakulty Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava

dekan Fakulty banictva, ekológie, riadenia a geotechnológií Technickej univerzity v Košiciach

dekan Lesníckej fakulty Technickej univerzity vo Zvolene

primátor mesta Banská Štiavnica

250 rokov od založenia Banskej akadémie a výučby chémie v Banskej Štiavnici

Banská Štiavnica - historické mesto na strednom Slovensku s výrazne multikultúrnou minulosťou, významnou banskou legislatívou a akademickou tradíciou. Dňa 11. decembra 1993 bolo mesto Banská Štiavnica s okolím zapísané do zoznamu Svetového kultúrneho a prírodného dedičstva UNESCO.

Banícka minulosť v Banskej Štiavnici

V stredoveku patrila Banská Štiavnica a okolie k hlavným producentom striebra a zlata v Rakúsko-Uhorskej monarchii. Toto územie nazývali aj „terra banensium“ (banícka krajina) už v roku 1156 a štatút kráľovského mesta získala Banská Štiavnica v roku 1238. V roku 1627 tu po prvýkrát použili v bani strelný prach. V priebehu 17. a 18. storočia keď dobývali hlbšie položené ložiská a nepostačovala ľudská a zvieracia sila na pohon čerpacích a ťažobných zariadení sa ako jediná alternatíva energetického pohonu ukázala voda. Keďže v prírodných podmienkach okolia Banskej Štiavnice nebol postačujúci zdroj vodnej energie, vytvorili sústavu umelých vodných nádrží, tajchov, v ktorých s akumulovala voda z atmosférických zrážok a následne sa jej energetický potenciál využíval na pohon banských a upravárenských zariadení. Prvé snahy o výstavbu umelých vodných nádrží boli už na začiatku 16. storočia, avšak až v prvej polovici 18.stor. došlo k ich rozsiahlej výstavbe a k vytvoreniu dômyselného banského vodohospodárskeho systému, ktorý nielenže zachránil banskoštiavnické baníctvo, ale súčasne znamenal, že sa na jeho energetickej základni vyvinula banská čerpacia technika, ktorá bola vzorom aj pre iné banské revíry na svete[1].

Banícka škola – Samuel Mikovíni

Príprava hutníkov a skúšačov v habsburskej ríši prebiehala formou remeselného zaškoľovania adepta pod vedením skúseného technika alebo skúšača. Hromadenie teoretických a praktických poznatkov z jednotlivých banských oblastí na Slovensku a neustále rastúce požiadavky na množstvo i odbornú úroveň vedúcich odborníkov v baníctve viedli v 17. storočí k zavedeniu organizovanej formy prípravy mladých adeptov na miesta vedúcich úradníkov v štátnej službe.

Banícka škola pre prípravu banských odborníkov bola v Banskej Štiavnici založená už v roku 1737 a jej poprednou osobnosťou sa stal vynikajúci banský odborník a kartograf Samuel Mikovíni (foto). Pre rozvoj poznatkov o chemickom zložení rúd a minerálov mala na Baníckej škole v Banskej Štiavnici značný význam aj výučba skúšobníctva. Roku 1746 vznikla banícka škola v Smolníku, ktorá mala vychovávať banských odborníkov v teórii a praxi predovšetkým pre bane a huty v obvode Košickej komory. Nedostatok kvalifikovaných odborníkov, rýchly rozvoj banských vied a technológie, potreba zvýšiť príjmy si vyžadovali založiť vyššie odborné banské učilište.

Pre vznik vedeckej chémie a pre jej ďalší vývoj zohrali mimoriadne významnú úlohu objavy, ktoré uskutočnili viacerí vedci v druhej polovici 18. storočia. Do 18. storočia prebiehal vývoj chémie v podstate v troch hlavných smeroch – v alchýmii, chemiatrii a v metalurgii. Rozhodujúcu úlohu vo vývoji chémie zohral najmä tretí smer – metalurgia, predovšetkým jej neoddeliteľná súčasť – skúšobníctvo. Skúšobníctvo bolo úzko spojené s výrobou kovov svojim empirickým skúmaním a hľadaním vhodných materiálov a postupov získavania kovov z rúd. Bolo účinným nielen pri vylepšovaní metód izolácie kovov, ale slúžilo súčasne na zdokonaľovanie vlastných techník a metód práce. Úspešne sa uplatňovalo aj skúšanie zloženia surovín a prísad, potrebných na optimálny priebeh tavby, neskôr aj pri skúšaní kvality získaných produktov.

Podnet Jána Tadeáša Peithnera

Začiatkom 18. storočia už spôsob výchovy banského odborného dorastu nevyhovoval. Ukázalo sa, že školenie formou banských škôl nebolo postačujúce. Stále viac sa potvrdzovalo, že sa musí zaviesť príprava odborníkov na vyššej ako stredoškolskej úrovni. Zásadný podnet , akým spôsobom by sa mal riešiť problém zabezpečovania náležite odborne vzdelaných banských a hutníckych odborníkov v bývalej monarchii, pochádzal od Jána Tadeáša Peithnera, registrátora Úradu najvyššieho mincovného a banského majstra v Prahe. J.T. Peihtner vypracoval elaborát o zavedení teoretického štúdia banských vied v českom kráľovstve a v apríli 1762 ho poslal panovníčke Márii Terézii do Viedne. V referáte navrhol zriadiť katedru montanistiky na Filozofickej fakulte Univerzity Karlovej v Prahe, alebo samostatnej banskej akadémie. Panovníčka vyjadrila súhlas s návrhom a 21. júla 1762 mu nariadila, aby svoj návrh prepracoval. Keď ho 4. septembra 1762 pozvali do Viedne na zasadnutie dvorskej kancelárie, vysvetlil význam navrhovaného štúdia mineralogických vied, baníctva, hutníctva a banského práva. Po preštudovaní druhého elaborátu zvolala Dvorská komora na 1. októbra 1762 schôdzu zainteresovaných odborníkov. Komisia podrobne prerokovala rozličné možnosti pre štúdium banských vied a všetci účastníci sa zhodli v

názore, že by sa mala zriadiť len jedna banícka akadémia pre všetky krajiny monarchie. V správe z tejto porady, odovzdanej panovníčke sa uvádza:

„Pri voľbe miesta bolo určené za najvhodnejšie dolnouhorské banské mesto Banská Štiavnica vzhľadom na to, že sú tam poruke úplné banské. stupové, hutnícke, pohonné a skúšobnícke zariadenia a popri nich aj ohňové, vodné a vzduchové stroje, štangenkunsty t.j. čerpacie zariadenia s kývavým pákovým prevodom, ktoré na iných miestach chýbajú. Na týchto zariadeniach môže profesor predvádzať svoje teoretické prednášky a poslucháči si môžu na týchto zariadeniach najrýchlejšie overiť svoje teoretické poznatky. Posledným sa tam naskytuje príležitosť osvojiť si chémiu, nakoľko súvisí s metalurgiou a naučiť sa aj mechaniku.“

Rozhodnutie cisárovnej Márie Terézie – 13. december 1762

Obsiahlu správu komisie predložili 22. októbra 1762 Márii Terézii. Panovníčka 13. decembra 1762 na základe kolektívneho návrhu najlepších odborníkov v krajine vydala nariadenie, že táto škola pre praktické vyučovanie baníctva sa zriadi v Banskej Štiavnici. Návrh na zriadenie vysokej školy s koncepciou teoreticko-praktického vyučovania sa po viacerých úvahách a diskusiách postupne aj realizoval. Cisárovná Mária Terézia ho rešpektovala a vyššie uvedeným nariadením sa zriadila škola v mieste na tento účel najvhodnejšom. Neskôr sa jednoznačne ukázalo, že najlepšie podmienky pre existenciu tejto školy mala Banská Štiavnica. V okolí sa nachádzal dostatok banských diel, kde sa ťažili a spracúvali rôzne rudy. Na tie časy tam boli najdokonalejšie technické zariadenia banskej hutníckej výroby.

Mikuláš Jozef Jacquin a prvá katedra novej vysokej školy

(foto Jacquin – profesor na Banskej akadémii v Banskej Štiavnici od 13.6.1763 do 28.2.1769 – t.j. 5 rokov)

Katedra chémie, mineralógie a metalurgie bola zriadená ako prvá katedra novej vysokej školy – **Baníckej akadémie**, dekrétom Dvorskej komory 13. júna 1763. Súčasne bol za prvého profesora chémie a mineralógie vymenovaný Mikuláš Jozef Jacquin (1727-1817), významný vedec v oblasti chémie a botaniky, ktorý dovtedy prednášal metalurgickú chémiu na viedenskej univerzite. Profesor Jacquin dobre poznal významné laboratóriá svojej doby v Európe, predovšetkým v Paríži. Francúzska chémia 18. storočia bola na veľmi vysokej úrovni. Počas svojich štúdií v Paríži ako aj v Leydene sa stretol s prednáškami a dielami mnohých vynikajúcich učencov tej doby. Vysoká úroveň vzdelania Jacqiuna bola nesporná, čo sa v plnej miere prejavilo pri zakladaní a vedení Baníckej akadémie.

Prvá prednáška z chémie pre vyše štyridsať študentov odznela v Banskej Štiavnici na Katedre chémie a metalurgie až 18.septembra 1764, čo ovplyvnili prípravy na začatie štúdia a zriadenie prvej katedry tejto školy.

Profesor Jacquin po príchode do Banskej Štiavnice v septembri 1763 a po oboznámení sa s miestom a podmienkami požiadal Dvorskú komoru vo Viedni o odloženie prednášok. Chcel sa dôkladnejšie oboznámiť s prostredím stredoslovenských banských centier, s banskými a hutníckymi závodmi Banskej Štiavnice, Banskej Bystrice, Kremnice a ďalších miest. Za najdôležitejšie pokladal zriadenie nového chemického laboratória, kde by mohol sám ako aj so študentmi experimentovať. V žiadosti uviedol: „Teória, ak sa súčasne nespája s experimentovaním, nemá opodstatnenie“. Rovnako potreboval čas na vybudovanie mineralogických zbierok. Dvorská komora dekrétom z 31. októbra 1763 jeho žiadosti o odloženie prednášok vyhovela a súčasne mu povolila vybrať si schopného pomocníka. M.J. Jacquin zriadil chemické laboratórium, ktoré malo špeciálny komín na odvod škodlivých výparov a dymov, stály zdroj tečúcej vody, vzdušné piecky, špeciálne piecky s mechanickým vháňaním vzduchu na skúšobnícke pokusy. Laboratórium bolo vybavené dostatočným množstvom chemických a skúšobníckych nádob, pomôcok a potrieb, viacerými druhmi váh a ďalším zariadením.

Pred začiatkom Jacquinových prednášok 22. júla 1764 navštívil laboratórium následník trónu Jozef II. V jeho sprievode bol arcikniežа Leopold, sasko-šaštínske kniežaAlbert, minister gróf Herberstein, gróf Ditrichstein a palatín gróf Pálffy. M.J. Jacquin im vyše troch hodín demonštroval rôzne chemické experimenty. Túto návštevu vo svojom denníku opisuje vo svojom denníku princ Leopold takto: ***„V nedeľu 22. júla 1764 po obede sme odišli k pánu Jacquinovi, profesorovi mineralógie, u ktorého sme videli rozličné pokusy z tohto umenia, ako aj z chémie. Okrem iného aj zapálenie kyseliny dusičnej železnými pilinami, vyzrážanie kovu pomocou iného kovu, zmenu farieb pomocou rozličných zmesí, získavanie zinku zo štiavnickej rudy, výrobu umelej rumelky podobnej rumelke Holanďanov...“***

Rešpektovanie základných názorov na chémiu priam predurčovalo postoj M.J. Jacquina k výučbe chémie. Je preto pochopiteľné jeho úsilie o vybudovanie kvalitného chemického laboratória ešte pred začiatkom vlastnej výučby, ktorú si nevedel vôbec predstaviť oddelene od vlastného experimentovania, najmä bez experimentálnej činnosti študentov.

O úrovni výučby chémie je možné urobiť si predstavu podľa prednášok profesorov. Jednou z ich povinností

určených Štatútom akadémie z roku 1770 bolo napísanie a publikovanie prednášok tlačou, formou učebnice.

Od svojho vzniku sa na novozriadenej vysokej škole zaviedol univerzitný charakter výučby. Na prednášky mali prístup všetci záujemcovia, ktorí splnili podmienky prjjatia na vysokú školu (vek, predbežne predpísané vzdelanie, prax). Navyše, všetci študenti museli povinne absolvovať laboratórne a praktické cvičenia, s aktívnou účasťou. Na záver prednáškového kurzu robili skúšky z teórie a praktických cvičení. Vďaka priaznivej zhody okolností, aj pokračovatelia M.J. Jacquina na katedre, najmä G.A. Scopoli (1723-1788) a A. Ruprecht (1748-1814) v tomto trende pokračovali.

Giovanni Antonio SCOPOLI

(foto - Scopoli – profesor chémie na Banskej akadémii v Banskej Štiavnici od 10.2.1769 do 30.1.1779 – t.j. 10 rokov.

Po odchode profesora Jacquina z Banskej Štiavnice do Viedne na lekársku fakultu, nastúpil na jeho miesto G.A. Scopoli, ktorý absolvoval štúdium medicíny v Insbrucku v roku 1743 a v roku 1763 bol vymenovaný za profesora chémie a mineralógie na novozriadenej Baníckej škole v Idrii, ktorá však čoskoro zanikla. V Banskej Štiavnici pôsobil desať rokov (1769–1779), potom bol preložený na Lekársku fakultu v Pavii kde bol menovaný za profesora chémie a botaniky.

Ťažisko jeho vedeckého záujmu sa na jeho novom pracovisku v Banskej Štiavnici presunulo z botaniky na mineralógiu. Už na predchádzajúcom pôsobisku v Idrii sa intenzívne zaoberal štúdiom mineralogickej ríše a dokončoval prehľad systematickej mineralógie. Na Baníckej akadémii v Banskej Štiavnici sa snažil pokračovať v šľapajach svojho predchodcu M. J. Jacquina.

Systém výučby chémie na banskoštiavnickej akadémii sa vyznačoval oproti iným chemickým katedrám (napr. na lekárskych fakultách) osobitosťou a výnimočnosťou. Išlo predovšetkým o dôsledné prepojenie teoretickej výučby s experimentálnou činnosťou a praxou. Profesor dopĺňal prednášky rôznymi experimentmi, ktoré nielen spestrovali prednášky a robili ich zaujímavejšími, ale mali aj motivačný význam a súčasne plnili funkciu názornosti výučby. Študenti po prednáškach, ktoré boli povinné, museli samostatne experimentovať v laboratóriách katedry. Okrem predpísaných povinných experimentov mohli navyše robiť pokusy aj podľa vlastného uváženia.

Týmto systémom a spôsobom výučby chémie, uplatňovaním na tie časy nových metód výučby sa katedra chémie banskoštiavnickej akadémie stala priekopníkom moderného vyučovania chémie. Patrí jej svetová priorita v uplatňovaní metódy experimentálnej práce formou pravidelných laboratórnych cvičení ako vlastnej súčasti vyučovacieho procesu, spojenej a úzko prepojenej na teoretickú prípravu. Bol to originálny systém výučby a na svoj čas jedinečný predovšetkým v 18. storočí, keď sa na iných vysokých školách takto nevyučovalo.

Najväčšia expanzia vedeckého výskumu na Banskej akadémii v Banskej Štiavnici bola v rokoch 1779 – 1792, keď sa profesorom na Katedre chémie stal Anton Ruprecht – prvý profesor chémie, rodák zo Slovenska, ktorý absolvoval akadémiu a vrátil sa na svoju alma mater ako učiteľ.

Pokračovanie v budúcom čísle.

Ocenenie vyučovacích metód na Banskej akadémii v Banskej Štiavnici vo Francúzsku

Nie je náhoda, že vo Francúzsku v porevolučnom období, keď sa pripravovala školská reforma, A.F. Fourcroy vysoko ocenil vyučovacie metódy používané vo výučbe chémie a fyziky v Banskej Štiavnici. Zdôrazňoval, že: ***"formy výučby pána Ruprechta, jeho laboratórna metóda má prednosť v tom, že práca na týchto cvičeniach sústreďuje zmysly študenta na pracovný postup, upevňuje ich pozornosť na okolnosti, ktoré niekedy uniknú profesorovi a skoro vždy študentom, ak neexperimentujú. Navyše študenti si zvykajú na cvičeniach hľadať najväčšiu jednoduchosť pochodov a dokonalosť svojej práce.***

Banícka škola v uhorskom Schemnitzi je skvelým príkladom prospešnosti cvičenia a praktizovania úkonov, ktoré predstavujú základ týchto užitočných vied. Laboratóriá v tejto škole sú vybavené potrebným náradím a materiálom a sú otvorené všetkým žiakom, aby si tu mohli zopakovať pokusy a aby na vlastné oči videli javy, ktorými sa látky vyznačujú vo svojich zlúčeninách."

A.F. Fourcroy v Konvente, v reči, ktorú predniesol 28. septembra 1794, odporučil prebrať systém výučby Banskej Štiavnice na novozriadený ústav pre výchovu inžinierov École centrale des travaux publics. Z tohto ústavu sa vyvinula slávna École Polytechnique , na ktorej študoval a pracoval aj Gay-Lussac.

V roku 1824 pracoval v súkromnom laboratóriu Gay-Lussaca (foto) aj Justus Liebig **(foto)**. Po skončení štúdií v Paríži odišiel do Nemecka a na návrh A. Humboldta **(foto)**, priateľa a spolupracovníka Gay-Lussaca menovali J. Liebiga profesorom chémie na Univerzite v Giessene. V Giessene zriadil J. Liebig kvalitné chemické laboratórium s orientáciou na štúdium podobné a porovnateľné so systémom štúdia chémie v Banskej Štiavnici, ktoré tu zaviedli. pred viac ako šesťdesiatimi rokmi.

Prevzaté z knihy: Oto Tomeček, Ivan Herčko:

Chémia a mineralógia na Baníckej a lesníckej akadémii v Banskej Štiavnici, Slovenská chemická spoločnosť, 2001.

M. Sališová

Spomienka na prof. Ing. Dr.techn. Františka Valentina.

Rodina a štúdium

V tomto roku uplynulo 120 rokov od narodenia významného chemika, pedagóga, organizátora vysokého školstva a vedy na Slovensku prof. Ing. Dr. techn. Františka Valentina.

F. Valentin sa narodil 5. februára 1892 v Hlohovci rodičom Ľudovítovi Valentinovi a Alojzii rod. Nežatickej, ktorí mali ešte dve dcéry Elenu Valentinovú a Margitu Nedbalcovú. Otec bol pôvodne knihárom a neskôr vychovávateľom väzňov, matka bola domáca. F. Valentin študoval na gymnáziu v Trnave a v Banskej Bystrici, kde v roku 1911 s vyznamenaním maturoval. Podľa priania matky, študoval na Teologickej fakulte Viedeňskej univerzity, kde ho v roku 1915 vysvätili. Potom v rokoch 1915-1920 pôsobil ako kaplán v Banskej Bystrici a krátko aj v Detve. Na základe žiadosti dostal z Vatikánu dišpenz od kňazských povinností. V roku 1926 sa cirkevne zosobášil s Margarétou rod. Tolnayovou, s ktorou mali dvoch synov dr. Ing. Kazimíra Valentina a MUDr. Mariana Valentina a dcéru RNDr. Ingrid Valentinovú. Rodina žila od roku 1926 v Prahe a od roku 1939 v Bratislave. Profesor Valentin zomrel 27. januára 1966 v Bratislave vo veku 74 rokov.

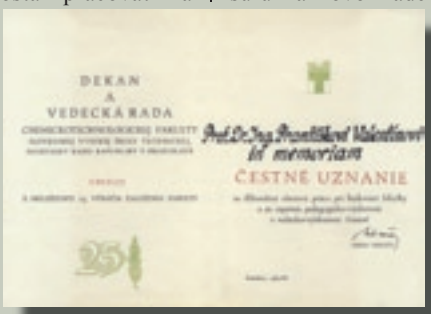
V odbornom živote prof. Valentina možno zreteľne rozlíšiť tri zhodou okolností trvaním porovnateľné, predsa však vykonávanými aktivitami rozdielne obdobia. Obdobie rokov 1925-1938 jeho vedeckého pôsobenia na Vysokom učení technickom v Prahe (ČVUT) a na vedeckých ústavoch v Paríži. Obdobie rokov 1938-1948 ako budovateľa a organizátora Slovenskej vysokej školy technickej v Bratislave, Slovenskej univerzity a jej Prírodovedeckej fakulty, ako aj Slovenskej akadémie vied a umení. Obdobie rokov 1948-1958 ako zakladateľa, budovateľa a vedeckého pracovníka slovenského potravinárskeho výskumu.

Praha a Paríž v rokoch 1925-1938

V roku 1920 sa F. Valentin zapísal ako riadny poslucháč na odbor chémie na Českom vysokom učení technickom v Prahe, kde v roku 1925 získal titul inžiniera. Po ukončení štúdia

Ing. Valentin zostal pracovať na ČVUT ako asistent medzinárodne uznávaného chemika profesora Emila Votočka, ktorý zameral nadaného a vedychtivého absolventa do svojho výskumu syntézy, štúdia štruktúry a vlastností sacharidov. Na základe výsledkov práce „Optický protinožec prírodnej ramnózy“ posúdenej vo Francúzskej akadémii, získal v roku 1927 titul doktor technických vied. V roku 1934 sa Dr. Ing. F. Valentin na základe obhájenia habilitačnej práce „O novej anhydrogalaktóze“ stal docentom ČVUT. Ako docent ČVUT prednášal „Chémiu cukrov“ a „Stereochémiu cukrov.“ Počas pôsobenia na ČVUT sám, alebo v spolupráci s prof. Votočkom publikoval 23 pôvodných vedeckých prác. Na základe významných vedeckých výsledkov a ich medzinárodného ohlasu získal diplom a odmenu z Riegrovho fondu a v roku 1937 bol zvolený za mimoriadneho člena Českej kráľovskej spoločnosti náuk. V rokoch 1937-1938 doc. Valentin absolvoval študijný pobyt v Paríži na prestížnom pracovisku Institut de Biologie Physico-chemique Sorbonskej univerzity a na Institut Curie, kde sa zoznámil s držiteľom Nobelovej ceny za chémiu Fredericom Joliotom-Curie. Získané výsledky z pobytu publikoval s francúzskou spolupracovníčkou Y. Khonvineovou v Comptes Rendus francúzskej akadémie, a dostal štipendium francúzskej vlády do konca školského roku 1940/1941.

Počas takmer dvadsaťročného pobytu v Prahe, F. Valentin študoval a pracoval v podmienkach predmníchovskej republiky, bol pod vplyvom prostredia, v ktorom zotrvávali a prežívali idey demokratizmu, humanizmu, slobody myslenia a bádania, ako aj vedeckej náročnosti. Profesora Valentina s prof. Votočkom spájalo aj frankofilstvo. Študijný pobyt v Paríži ho v týchto intenciách ešte ďalej utvrdil, čo ovplyvnilo aj jeho ďalšie životné postoje po návrate na Slovensko.


DEKAN
A
VEDECKÁ RADA
ČESTNÉ UZNANIE

Bratislava 1939-1948

Doc. Valentin patril v tom čase k niekoľko málo aj medzinárodne uznávaným slovenským vedcom a predstavitelia autonómnej slovenskej vlády mu koncom roku 1938 ponúkli profesúru na novozriadenej Vysokej školy technickej. Na základe jeho žiadosti bol z VŠCHT v Prahe k 1.4.1939 uvoľnený a jeho miesto profesor Votoček obsadil budúcim akademikom Ottom Wichterlom. Doc. Valentin sa vracia na Slovensko aby pomohol budovať a organizovať vysoké školstvo a vedy prírodovedného zamerania, najmä odbor chémie. Náročnosť tejto úlohy je zrejmá zo stavu v akom sa prírodné vedy a špeciálne štúdium chémie nachádzalo. Študenti zo Slovenska študovali prírodné vedy, vrátane chémie, v Prahe, Brne alebo ojedinele v zahraničí, pretože k zriadeniu prírodovedeckej fakulty v rámci Univerzity Komenského v zmysle zákona z roku 1919 nedošlo. Vzhľadom na hroziace nemecké nebezpečenstvo zákonom z r. 1937 bola prednostne zriadená Vysoká škola technická, na ktorej sa vyučovanie začalo v šk. r. 1937/1938. Na pôde VŠT v priebehu kompletizácie výuky sa položili základy viacerých, nielen technických odborov, ale aj prírodovedných a ďalších odborov, z ktorých postupom času vznikali samostatné fakultné a ústavné pracoviská.

Zákonom z roku 1939 bola zriadená VŠT so šiestimi odbormi, vrátane chemickotechnologického inžinierstva, a odboru špeciálnych náuk, vrátane oddelenia prírodných vied pre kandidátov učiteľstva na stredných školách, ako náhradu za nezaloženú prírodovedeckú fakultu. Tento právny rámec bolo treba naplniť opatreniami, týkajúcim sa umiestnenia školy, obsadenia nových profesúr a docentúr, zriadenia nových ústavov a pracovísk, budovanie knižníc, laboratórií a akademických úradov. Priestorové problémy sa riešili adaptáciou mestských budov, ktoré však zostali len provizóriami a boli lokalitne roztrieštené. K nedostatku vysokoškolských pedagógov výrazne prispelo aj to, že autonómna slovenská vláda po dohode s ústrednou vládou v Prahe prepustila k 31.12.1938 väčšinu českých pedagógov. V súvislosti

s uzavretím českých vysokých škôl na jeseň roku 1939 sa počet poslucháčov zvýšil o Slovákov, Čechov ako aj vo veľkom počte Bulharov (vyše 100), ktorí dovtedy študovali v Prahe a v Brne, ktorým sa umožnilo dokončiť svoje štúdiá na SVŠT.

V šk. r. 1940/1941 bol otvorený odbor chemickotechnologického inžinierstva SVŠT. Oddelenie prírodných vied po jednoročnej existencii na SVŠT bolo zrušené, pretože zákonom z roku 1940 bola zriadená Prírodovedecká fakulta Slovenskej univerzity. V tom čase štúdium chémie na SU nemalo inštitucionálnu základňu. Prvý zápis prírodovedcov na SU sa uskutočnil v jeseni 1939 na Filozofickej fakulte SU. Vedenie SU vyšlo v ústrety slovenským študentom aby mohli študovať prírodovedné disciplíny na Slovensku i za cenu provizorného riešenia bez dostatočného priestorového, materiálneho aj pedagogického zázemia. Profesor Valentin, od začiatku roka 1939 pôsobil na SU ako riadny profesor anorganickej a organickej chémie a biochémie na Lekárskej fakulte SU a v roku 1940 bol menovaný neplateným profesorom chémie na Prírodovedeckej fakulte SU, kde prednášal organickú chémiu . Pedagógovia SVŠT prof. Ilkovič, prof. Krempaský, doc. Prístavka a doc. Skotnický z LF SU nielen prednáškami, ale aj poskytnutím priestorov a laboratórií významne pomohli pri riešení počiatočných problémov štúdia chémie na SU. Prírodovedecká fakulta SU vznikla na základe zákona z roku 1940 a bola otvorená v zimnom semestri šk.r. 1940/1941, keď súčasťou fakulty sa stali prírodovedné ústavy odčlenené z Filozofickej fakulty SU. Profesor Valentin sa stal prvým dekanom Prírodovedeckej fakulty SU v šk.r. 1940/1941 a funkciu dekana vykonával aj v nasledujúcom šk.r. 1941/1942. V roku 1943/1944 bol prorektorom a v r. 1944/1945 bolo rektorom SU.

Profesor Valentin pôsobil od januára 1939 na SU ako riadny profesor a prednosta Ústavu lekárskej chémie na Lekárskej fakulte SU, prednášal lekársku chémiu a viedol laboratórne cvičenia aj pre študentov lekárnictva. Svoje prednášky zameriaval okrem základnej anorganickej a organickej chémie na prírodné látky s vysvetľovaním vzťahov medzi štruktúrou a ich biologickou funkciou. Stal sa zakladateľom fyziologickej a klinickej chémie na Slovensku. Spracoval poznatky o vitamíne C a vysvetlil jeho vzťah k rôznym ochoreniam. Študoval rôzne postupy prípravy vitamínu C, ktorá by zabezpečila jeho široké využitie v lekárskej praxi. Za prínos v lekárskej chémii bol prof. Valentinovi udelený čestný doktorát medicíny.

Profesor Valentin popri SU súčasne pôsobil aj na SVŠT v Bratislave V roku 1941 sa stal bezplatným riadnym profesorom organickej chémie na odbore chemickotechnologického inžinierstva. V rokoch 1941-1948 bol prednostom Ústavu organickej chémie SVŠT. Dve funkčné obdobia v rokoch 1941/1942 a 1942/1943 bol rektorom SVŠT a v rokoch 1943/1944 a 1944/1945 bol prorektorom SVŠT. Výhodnejšie personálne, priestorové aj materiálne podmienky pre výučbu chémie na SVŠT zásluhou prof. Valentina využívali aj študenti chémie SU, ktorí navštevovali niektoré prednášky a cvičenia spolu so študentmi SVŠT.

Významné aktivity prof. Valentin preukázal aj pri organizovaní slovenskej vedy. Vzhľadom na budovanie slovenských univerzitných inštitúcií pedagógovia boli plne vyťažení touto prácou a pre vedecké bádanie im už nezostávalo veľa priestoru. Prof. Valentin bol predsedom Slovenskej náučnej spoločnosti pri Matici Slovenskej a pri jej transformácii na Slovenskú akadémiu vied a umení spolupracoval s vynikajúcim jazykovedcom prof. Ľudovítom Novákom z Filozofickej fakulty SU. SAVU bola zriadená zákonom z roku 1942 a prof. Valentin sa stal jej prvým predsedom prof. Ľ. Novák generálnym tajomníkom. SAVU vo vývoji slovenskej vedy organizačne predstavovala dovtedy najvyšší stupeň. Prof. Valentin sa angažoval v tejto vrcholnej slovenskej vedeckej inštitúcii ako redaktor jej periodík a zborníkov, časopisu Physiographica Slovaca, zborníka Acta Physiographica Slovaca, Carpatica Slovaca, Technického obzoru slovenského so samostatnou Prírodovedeckou prílohou. Vysokoškolskí učitelia tak dostali možnosť publikovať výsledky svojej vedeckovýskumnej činnosti, a časopisy zohrali tiež významnú úlohu pri rozvoji technických vied na Slovensku.

Pri vykonávaní početných akademických funkcií prof. Valentin sa vždy snažil slúžiť objektívnym záujmom slovenského vysokého školstva a vedy s cieľom povzniesť ich na vyššiu kultúrnu úroveň, využijúc obdobie, ktoré bolo pomerne priaznivé pre rozvoj slovenskej štátnosti a národnej identity. Vďaka priaznivým okolnostiam si slovenské univerzity mohli zachovať pomerne samostatné postoje, aj keď vonkajšie politické tlaky nebolo možné vždy eliminovať. Prof. Valentin vždy prejavoval nezávislé postoje, nestotožňoval sa s myšlienkou národného socializmu nemeckého typu. V roku 1941 prof. Valentin ako člen profesorského zboru SVŠT kritizoval pozývanie nemeckých profesorova Slovensko ako náhradu za všeobecný nedostatok vysokoškolských pedagógov. Zdôraznil, že z Nemecka chcú vyslať ľudí o ktorých SVŠT nemá záujem a tých, o ktorých záujem má, zase nepustia na Slovensko. Nedôvera súvisela s tým, že účinkovanie nemeckých pedagógov sa chápalo ako nemecký tlak na slovenskú kultúru, najmä možné ovplyvnenie prírodovedeckých pracovísk ktoré sa iba začali budovať. Reakciou na tento tlak bolo aj urýchlenie menovaní nových profesorov a docentov na SVŠT a SU. Iný príklad nezávislého postoja prof. Valentina bolo, keď v posledných mesiacoch pred koncom vojny oficiálne nemecké orgány ponúkali možnosť evakuácie SU do Göttingenu, profesor Valentin to spochybnil s tým, že sa jedná o záležitosť čisto súkromnú. Fakulty SU evakuovali svoj prístrojový a knižný inventár na stredné Slovensko a do okolia Bratislavy. Keď sa zákonom v januári 1945 presadilo menovanie profesorov bez predchádzajúceho návrhu univerzity, prof. Valentin ako rektor SU spolu s akademickým senátom sa demonštratívne vzdali svojich funkcií. Je zrejmé, že takéto zásadové postoje mohol prof. Valentin zaujať aj vďaka ďalším osobnostiam vo vedení oboch univerzít, ktoré mali záujem na rozvoji slovenského školstva, vedy, kultúry a vôbec celkovom rozvoji Slovenska.

Ako vysokoškolský pedagóg počas pôsobenia na SU a SVŠT sa podieľal na vzdelávaní početných prírodovedcov, lekárov a technikov, pre ktorých pripravoval aj vysokoškolské učebné texty. Od študentov vyžadoval dokonalú znalosť študovanej problematiky aj presné vyjadrovanie po vzore Votočkovej školy. Preto sa mohol zdať pre študentov trochu neprístupným a prísnym. Skrývala sa však za tým jeho snaha vychovať nových slovenských odborníkov ako pracovníkov schopných vedeckej súťaže so zahraničím.

V období Slovenského štátu sa v prospech režimu angažovalo iba niekoľko málo vysokoškolských pedagógov prívržencov radikálneho krídla HSĽS, ktorí pred príchodom frontu v roku 1945 odišli do zahraničia, prof. Valentin k nim nepatril. Po obnove ČSR v roku 1945 v rámci tzv. očisty

univerzít od skompromitovaných učiteľských kádrov bol prof. Valentin uvoľnený z profesorských funkcií. Zostal ďalej pôsobiť na Lekárskej fakulte, kde ešte v rokoch 1945-1948 vykonával externe funkciu prednostu Ústavu lekárskej chémie LF SU a na SVŠT zostal pôsobiť ako profesor a prednosta Ústavu organickej chémie SVŠT. V roku 1948 v dôsledku februárových udalostí prebehla rozsiahla reforma univerzitného štúdia, ktorá sa začala realizovať od šk.r. 1948/1949. Prebiehajúca „demokratická očista škôl" z profesorských zborov odstránila učiteľov, ktorí sa nestotožnili s novým režimom. Na tomto základe bol prof. Valentin ako 56 ročný nespravodlivo predčasne penzionovaný. Sám sa k tomu vyjadril 10 dní pred smrťou rektorovi VŠCHT ako odpoveď na jeho žiadosť, kde napísal „Venoval som veľa úsilia pri vzniku a celkovom vývoji prvej Slovenskej technickej školy, avšak neustále som narážal na ťažkosti. Neskôr som bol z funkcie profesorskej odvolaný – v dobe, keď som mohol ešte veľa spraviť v prospech školy. Stretol som sa s osobnou zaujatosťou, s rôznymi pre mňa nepochopiteľnými intrigami. Toto všetko vo mne vyvolalo nesmierny pocit roztrpčenia". List je napísaný niekoľko dní pred smrťou po dlhej chorobe s depresívnymi stavmi, ktoré mohli ovplyvniť toto jeho vyjadrenie, predsa však uvedené skutočnosti a vynútené penzionovanie v produktívnom veku bolo skutočnosťou.

Bratislava 1948-1958

Po vynútenom odchode zo slovenských univerzít, v rokoch 1948-1958 pôsobil ako vedúci vedecký pracovník v novovzniknutom oddelení pre výskumníctvo Slovenského priemyslu výživy, z ktorého neskôr vznikol Výskumný ústav potravinárskeho priemyslu. Na tomto pracovisku inicioval vedeckovýskumné aktivity v slovenskej potravinárskej chémii. So svojimi spolupracovníkmi skúmal o.i. možnosti zachovania vitamínu C pri priemyselnom spracovaní surovín a výrobkov potravinárskeho priemyslu, ako aj možnosti zámeny potravinárskych umelých farbív prírodnými farbivami z domácich stromov a plodov divorastúcich krov a rastlín ako náhrady za dovážané výrobky. Skúmal tiež obsah vitamínu A a karoténu v surovinovej báze slovenského potravinárskeho priemyslu. Výsledky výskumu publikoval spolu so spolupracovníkmi vo vyše 10 prácach v Chemických zvestiach, v časopisoch Technická práca, Průmysl potravin, Výživa a zdravie. Príspevok týchto prác pre rozvoj potravinárskej chémie a potravinársku prax bol odbornou verejnosťou vysoko kladne hodnotený

Záver

Okrem už uvedených, rozsiahlosť jeho odborných a spoločenských aktivít dokladujú aj jeho ďalšie funkcie a členstvá vo vedeckých, spoločenských a odborných komisiách. V roku 1939-1940 bol senátorom Akademického senátu SU, v rokoch 1941-1945 správcom záhrady SU, členom osobitnej komisie SU pre spoluprácu s Lipskou univerzitou, členom skúšobnej komisie pre učiteľstvo na stredných školách, členom hospodársko-finančnej komisie SU, funkcionárom Spolku chemikov Slovákov, členom prvej redakčnej rady časopisu Chemické zvesti (1947-1950), členom redakčnej rady Bratislavských lekárskych listov, predsedom Spolku Slovenského Červeného kríža. Po vojne bol členom šesťčlenného Kolégia vysokoškolských pracovníkov a národohospodárskych odborníkov na vytváranie podmienok pre rozvoj farmaceutického priemyslu. Spolu s profesorom F. Švecom, organizátorom štúdia farmácie na LF SU, má veľké zásluhy pri zakladaní výroby liečiv v Slovakofarme, veho rodnom meste Hlohovci, ako aj pri zavedení výroby kyseliny citrónovej v Leopoldove. Prof. Valentin tak úspešne spájal bádateľský výskum s jeho realizáciou v praxi.

Prof. Valentin všetky zverené funkcie vykonával s plným nasadením, s bezprikladnou pracovitosťou a usilovnosťou, múdrosťou a zásadovosťou. Vo významných akademických funkciách rektora a prorektora SVŠT aj SU, dekana Prif SU významne prispel k vybudovaniu moderného vysokého školstva. Významne sa zaslúžil o zriadenie Slovenskej akadémie vied a umení ako jej prvý predseda. Bol priekopníkom modernej organickej chémie, lekárskej chémie ako aj potravinárskej chémie, vedcom širokého rozsahu riešených problematík, ktorého význam presiahol hranice Slovenska. Popri svojich hlavných oblastiach vedeckého záujmu, vyznačoval sa aj neobyčajnými poznatkami vo všeobecnej chémii, matematike, fyzike, astronómii, prírodnej filozófii, teológii, ovládajúci dokonale rad svetových jazykov. Priatelil sa s prof. MUDr. E. Filom, prof. MUDr. Fridrichovským, prof. MUDr J Baborom, z LF SU a s jazykovedcom prof. Ľudovítom Novákom z FF SU a s onkológom, neskorším akademikom Viliamom Thurzom. Pri príležitosti 75. narodenín jeho významného pražského učiteľa E. Votočka, v roku 1947 v mene slovenských chemikov v Chemických zvestiach prof. Valentin brilantne zhodnotil jeho životné výsledky, čím sa prejavil aj ako vynikajúci štylista.. Počas Slovenského štátu bol prof. Valentin vyznamenaný bulharským Radom s hviezdou za občianske zásluhy II. stupňa a Slovenským krížom za zásluhy v obrane štátu.V roku 1966 pri 25. výročí založenia Chemickotechnologickej fakulty SVŠT v Bratislave, jej dekan a vedecká rada udelila prof. Dr. Ing. Valentinovi in memoriam čestné uznanie „za dlhoročnú obetavú prácu pri budoaní fakulty a za úspešnú pedagogicko-výchovnú a vedeck-výskumnú činnosť"

Predložený prehľadový článok o význame prof. Valentina pre budovanie a rozvoj slovenského univerzitného školstva, najmä odboru chémie, ako aj slovenskej vedy, vzhľadom na mnohostrannosť a obsiahlosť vykonaných aktivít, nemohol obsiahnuť všetky tieto oblasti a dosiahnuté výsledky. Vzhľadom na význam osobnosti prof. Valentina je potrebné ďalšie odkrývanie aj skrytých informácií o jeho živote tak, aby obraz o jeho vykonanom diele sa stal ešte úplnejším, stal sa príkladom a vzorom pre ďalšie slovenské generácie.

Literatúra

- Pamätnica k 35. výročiu Chemickotechnologickej fakulty SVŠT, ALFA Bratislava 1975
- Päťdesiat rokov Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského, Univerzita Komenského Bratislava, 1992.
- Univerzita Komenského 1919-1994, Bratislava, Univerzita Komenského, Bratislava, 1994.
- Otto Wichterle, Vzpomínky, IDEU REPRO, Praha, 1996.
- Slovenská technická univerzita v Bratislave, 60 rokov, STU, Bratislava, 1997.
- M. Uher, Prof. Ing., Dr.techn. František Valentin, FCHPT STU, Bratislava, 2012.

Poďakovanie

Ďakujeme MUDr. M. Valentinovi, synovi a Ing. M. Valentinovi, vnukovi prof. Valentina za poskytnutie informácií z rodinného archívu.J. Imrich

M. Uher, V. Milata

Ukončenie osláv Medzinárodného roku chémie 2011 v Poľsku a oslava 100. výročia udelenia Nobelovej ceny Márie Skłodovskej-Curie

Priebeh osláv Medzinárodného roku chémie mal v Poľsku nevšednú príchuť danú jeho podnadpisom: 100. výročie udelenia Nobelovej ceny Márie Skłodovskej-Curie v odbore chémia, najznámejšej poľskej vedkyne, jedinej nositeľke dvoch Nobelových cien a to v dvoch odboroch – fyzike a chémii. Jej životopis uvádzame na inom mieste. Vo svete bol Medzinárodný rok chémie označovaný skratkou IYC 2011, k čomu v Poľsku pribudla aj MSC-100.

Celoročné aktivity sa konali pod čestným patronátom poľského prezidenta pána Bronisława Komorowského a patronátom Waldemara Pawlaka, vicepremiéra a ministra hospodárstva, Barbary Kudryckej, ministerka vedy a vysokého školstva, Radosława Sikorského, ministra zahraničných vecí, a Bogdana Zdrojewského, ministra kultúry a národného dedičstva. V čestnom výbore boli autority PTCh, Politechniky a Univerzity Varšava, Jagiellońskej, lekárskej a M. C.-Skłodovskej, veľvyslanca Francúzskej republiky v Poľsku, predsedu Poľskej akadémie vied a ďalších.

Odrazilo sa to vo viacerých materiáloch dostupných napríklad v Múzeu M. Skłodovskej-Curie, viacerých autobiografických diel, vo vydaní bankovky s nominálnou hodnotou 20 Złotych uvedenej do obehu práve 25. novembra 2011 s averzom M. Skłodovskej-Curie a univerzity Sorbona a reverzom A. Nobela s Ústavom rádia vo Varšave (http://www.nbp.pl/homen.aspx?f=/en/banknoty/kolekcjonerskie/2011/2011_banknot_100_rocznica_rocznica_nobla_marii_sklodowskiej-curie_20zl_en.html), medaila M. Skłodovskej-Curie, DVD s materiálmi o M. Skłodovskej-Curie, brožúre Kobiety w nauce, zborníku Misja Nauk Chemicznych a mnohými ďalšími. Na webovej stránke: http://www.ptchem.pl/iyc2011 je uvedený impozantný zoznam aktivít poľského ale aj medzinárodného významu spojených s IYC 2011 či MCS-100.

Pri tejto príležitosti sa aj uskutočnila 25. novembra 2011 doobeda vedecká konferencia v sídle Poľskej chemickej spoločnosti (PTCh) vo Varšave, v rodnom dome M. Skłodovskej-Curie na ulici Freta 16 (http://www.ptchem.pl/aktualnoci/82-sesja-naukowa-na-freta). V tomto dome, patriacom PTCh je zároveň múzeum M. Skłodovskej-Curie. Na konferencii odzneli zaujímavé prednášky, napr. Úloha chemických vied (predniesol B. Marciniec), Či by bol potrebný sponzor M. Skłodovskej-Curie ? (M. Żylicz), Liquid-liquid extrakcia použitím iónových kvapalín: od objavu k pochopeniu (I. Billard), Univerzita M. Skłodovskej-Curie pomenovaná po veľkej vedkyni (A. Komosa), Mária a jej život (B. Skwarzec) a veľmi zaujímavý príspevok Prof. nadzw. dr hab. med. Macieja Banacha z Ministerstva veda a vysokého školstva na tému: Úloha exaktných vied v spoločnosti a vede za ktorou nasledovala prehliadka Múzea M. Skłodovskej-Curie s výkladom jej riaditeľky Mgr. M. Sobieszczak-Marciniakovej. V rámci konferencie bola odovzdaná predsedovi PTChem prof. Boguslawovi Buszewskému Čestné členstvo SCHS, ktoré mu bolo navrhnuté a schválené v minulom roku za rozvoj spolupráce medzi slovenskými a poľskými chemikmi (FCHPT, SAV, FaF a i.)..

Slovenská chemická spoločnosť bola jedinou zahraničnou chemickou spoločnosťou, pozvanou na túto konferenciu ale aj zároveň na poobedňajší Záver osláv 100-ého výročia udelenia Nobelovej ceny za chémiu M. Skłodovskej-Curie. Táto sa konala pod záštitou pánov Bronisława Komorowského, prezidenta Poľskej republiky a pána Nicolasa Sarkózyho, prezidenta Francúzskej republiky, ktorých povorenci spolu s vnučkou M. Skłodovskej-Curie Helene Langevin a predstaviteľmi patronátnych inštitúcií otvorili záverečný ceremoniál. Po príhovoroch patrónov uvedených v úvode a pozdravoch nositeľov Nobelovej ceny: prof. Ada T. Yonath, prof. Yuan Tseh Lee a prof. Jean-Marie Lehn poľská a francúzska strana zosumarizovala akcie k tomuto výročiu, filmy premietnuté dva krátkometrážne filmy o živote M. Skłodovskej-Curie, predstavená spoločná švédsko-poľská známka s motívom M. Skłodovskej-Curie a ďalšie poštové ceniny a do obehu daná už spomínaná bankovka. Potom odzneli dve prednášky: Veľkosť M. Skłodovskej-Curie (prof. A. K. Wróblewski) a Od kontaktnej terapie k alfaimunoterapii. Storočie progresu v medicíne ako zásluha M. Skłodovskej-Curie (prof. A. Aurengo, NAM Paríž) a koncert z diel poľských autorov zavŕšil túto oslavu, ktorej tvoril významný slávnostný rámec.

Slovensko môže v dobrom závidieť takéhoto vedca, ženu s takýmto medzinárodným ohlasom a ocenením ako je Nobelova cena, dokonca dvojnásobná a v dvoch rôznych odboroch. Ale Poľsko to dosiahlo svojou dlhodobou podporou vedy, myslenia, vzdelania, úctou k intelektuálnej práci, ale aj záujmom a podporou štátnych orgánov o prácu učiteľov a vedcov, s ktorou sa stretávam každoročne pri návštevách zjazdov PTChem. Veď len PTChem každoročne udeľuje jednu alebo viac z 8 medailí a 6 menných cien. Je na čo byť hrdí!

M. Uher, V. Milata

Mária CURIE-SKŁODOWSKA (1867 – 1934)

Objaviteľka prvkov polónia a rádia. Prvá žena, ktorá sa stala univerzitnou profesorkou na parížskej Sorbone. Prvá nositeľka dvoch Nobelových cien a prvá nositeľka dvoch Nobelových cien v rôznych odboroch1. Jej práca iniciovala vznik novej vednej disciplíne – rádiochémie, otvorila svetu nukleárnu éru.

Mária Curie-Skłodowská sa narodila 7. novembra 1867 vo Varšave. Bola najmladšou dcérou gymnaziálneho profesora fyziky a matematiky. Ukončila dievčenské gymnázium v roku 1883 – ešte nemala 16 rokov a už ovládala 4 jazyky: rusky, francúzsky, nemecky a anglicky. V rokoch 1884 až 1891 bola súkromnou učiteľkou a navštevovala prípravné univerzitné kurzy, vzdelávala sa v chemickej analytike a oboznamovala sa s vedeckou prácou.

V roku 1891 prišla do Paríža na štúdiá – zapísala sa na prírodovedeckú fakultu Sorbony. Už v roku1893 získala licenciát z fyziky, potom z matematiky (1894) a o dva roky neskôr právo vyučovať na stredných školách (licenciát bol po hodnosti bakalára druhým vedeckým stupňom univerzitného štúdia, po ňom nasledoval doktorát príslušných vied).

V roku 1895 sa vydala za Pierra Curie (1859-1906), ktorý zdieľal jej náklonnosť a záujem o vedeckú prácu. Spoločne začali skúmať žiarenie uránových rúd. Analyzovali jáchymovský smolinec a v júli 1898 mohli ohlásiť objav nového prvku, ktorému dali meno **polónium** (na počesť vlasti Marie Curie-Skłodowskej). Koncom roku 1898 objavili druhý prvok **rádium** (z lat. slova radius – žiarenie) a žiarenie, ktoré študovali označili ako **rádioaktivita**.

12. júna 1903 Mária Curie-Skłodowská získala doktorát z fyziky na Parížskej univerzite, v tom istom roku získala s manželom a Henry Becquerelom Nobelovu cenu za fyziku. Bola prvou ženou v histórii, ktorá získala toto uznanie. Po získaní Nobelovej ceny sa stali manželia Curie slávnymi. Sorbona povolala Pierra na profesorské miesto a umožnila mu vytvorenie vlastného laboratória, ktorého vedeckým riaditeľom sa stala Mária Curie-Skłodowská.

Po tragickej smrti Pierra Curieho následkom nehody 19. apríla 1906 bola Mária vymenovaná za jeho nasledovníčku vo funkcii vedúcej katedry fyziky na Sorbone. Prvý raz v histórii univerzity začala prednášať žena. Vedľa učiteľského pôsobenia pokračovala aj vo vedeckej práci.

V roku 1911 bola Mária Curie-Skłodowská poctená druhý raz **Nobelovou cenou za chémiu**, za objavy polónia a rádia, izoláciu rádia v kovovom stave a za výskumy jeho zlúčenín.

Aj po tomto veľkom úspechu pokračovala Mária Curie-Skłodowská vo vedeckom výskume už v novom Rádiologickom ústave, vybudovanom v roku 1914 ako jeho prvá riaditeľka a jeho fyzikálnochemické oddelenie viedla až do jej smrti.

Počas prvej svetovej vojny zorganizovala mobilnú rádiologickú jednotku a priamo na frontovej línii častokrát sama vyšetrovala ranených alebo zacvičovala rádiologických asistentov. Po vojne opäť viedla výskumy v Rádiologickom ústave, prednášala na Sorbone, napísala a vydala monografie o rádioaktivite. Napriek väzbám k Francúzsku, vždy udržovala úzke styky s jej rodnou krajinou. Jej úsilie a priama pomoc umožnila rozvinúť výskum rádioaktivity v Poľsku. Roku 1933 mala posledné prednášky na Sorbonskej univerzite.

Mária Curie-Skłodowská zomrela 4. júla 1934 na leukémiu spôsobenú dlhodobou expozíciou rádioaktívnymi látkami. Pre vedecké úspechy bola ocenená mnohými vyznamenaniami, čestnými titulmi viacerých univerzít a čestnými členstvami učených spoločností.

1. J. Bardeen: 1956, 1972 – fyzika; L. C. Pauling: 1954 – chémia, 1962 –mier; F. Sanger: 1958, 1980 - chémia a organizácie: ICRC: 1917, 1944, 1963 – mier a UNHCR: 1954, 1981 – mier.

M. Uher, V. Milata

2011 – Rok Márie Curie-Skłodowskej: aj rastliny nesú jej meno

Ruža „Mária Curie“

V zbierke rastlín botanickej záhrady UMCS (Univerzity Márie Curie-Skłodowskej v Lubline) sa nachádza ruža s názvom „Mária Curie“ (synonymum „Meilomit“ i romantické sny), ktorú vypestoval Francúz Alain Meilland v roku 1997.

Ruža patrí do skupiny ruží vhodných do kytíc. Je to odroda novodobá, odolná chorobám, ľahko sa prispôsobuje podmienkam a toleruje i vyššie teploty. Vyznačuje sa peknou medenomarhuľovou-ružovo-zlatou farbou poloplných kvetov v priemere do 9 cm a delikátnou vôňou pukov. Kríky ruže „Mária Curie“ sú dosť široké a dorastajú do 60-80 cm a kvitnú od júna do septembra.

Všeobecne možno povedať, že je to ruža veľkého charakteru.

Podľa Wiadomości Universyteckie, s. 59, 8/177, 2011.

M. Uher, V. Milata

Klematis (plamienok) „Mária Skłodowská-Curie“

Počas 19. medzinárodnej výstavy „Zeleň je život“ (aká podobnosť s heslom Medzinárodného roku chémie ?), ktorá sa uskutočnila 26.-28. augusta 2011 v centre EXPO Varšava bola prezentovaná najnovšia poľská odroda plamienku pomenovaná na počesť „Poľky všetkých časov“ - Márie Curie-Skłodowskej.

Nová odroda plamienku „Mária Curie-Skłodowská“ bude prezentovať Poľsko a jeho bohatú históriu popri vo svete už známych poľských odrôd plamienku ako Ján Pavel II, generál Sikorski, Westerplatte, Solidarność, Lech Walesa ai (http://www.clematis.com.pl/wms/wmsg.php/).

Plamienok „Mária Skłodowská-Curie“ je atraktívna popínavá rastlina s početnými plnými bielymi kvetmi. Veľké kvety o priemere 10-12 cm kvitnú od júna do júla, ba aj do konca septembra. Dorastá do výšky 1,7 – 2 m. Odroda je vhodná do rôznych záhradných úprav. Je to rastlina mrazovzdorná, vyžaduje miesto s dobrým osvetlením, humus, vlhkosť ale priepustnosť substrátu.

Podľa Wiadomości Universyteckie, s. 59, 8/177, 2011; http://www.clematis.com.pl;

M. Uher, V. Milata

Profil Vedca roka 2011 – prof. Ing. Romana Boču, DrSc.

Priblížme si osobnosť a vedecký profil prof. Boču

Profesor Roman Boča sa od počiatkov štúdia na Chemickotechnologickej fakulte Slovenskej vysokej školy technickej (dnes STU) v Bratislave venoval kvantovej chémii koordinačných zlúčenín, v podobe študentských vedeckých prác, diplomovej práce, dizertačnej práce, doktorskej dizertačnej práce, habilitačného a inauguračného spisu. Doktorskú dizertačnú prácu obhájil ako 37 ročný a za profesora chémie bol vymenovaný vo veku 43 rokov. Považuje sa za priekopníka kvantovej chémie koordinačných zlúčenín na Slovensku vrátane príslušného softvéru, ktorý bol globálne distribuovaný cez Quantum Chemistry Program Exchange - USA. Teoretické znalosti zužitkoval v oblasti experimentálnej a teoretickej magnetochémie, ktorú rozvíja ostatných 20 rokov. Publikoval vyše 200 karentovaných publikácií prevažne v zahraničných periodikách európskeho a svetového impaktu. Jeho práce sú citované vyše 1800 krát. Je autorom 20 monografií, z ktorých posledná – A Hanbook of Magnetochemical Formulae - vyšla vo svetovom vydavateľstve Elsevier v rozsahu 1010 strán. Bol riešiteľom radu domácich a zahraničných projektov s podporou grantových agentúr APVV, VEGA, DAAD, ESF a COST. Bol zodpovedným riešiteľom a vedeckou osobnosťou Centra excelentnosti APVV „Magnetoaktivita, elektroaktivita a fotoaktivita koordinačných zlúčenín“. Rozvinul širokú vedeckú spoluprácu v Európe aj mimo nej. Vychoval rad diplomantov a doktorandov.

Za čo bolo udelené ocenenie vedec roka?

Ocenenie sa udeľuje za: „mimoriadnu publikačnú aktivitu v oblasti experimentálnej a teoretickej magnetochémie s vyústením do formulácie magnetoštruktúrnych D-korelácií umožňujúcich ladiť magnetickú anizotropiu, a tak vytvoriť podmienky pre racionálnu syntézu jednomolekulových magnetov, ako aj za a úspešné

vedenie projektu Centra excelentnosti „Magnetoaktivita, elektroaktivita a fotoaktivita koordinačných zlúčenín“

V ocenení sa uvádza:

Prof. Roman Boča so svojím výskumným tímom ako prvý v globálnom merítku formuloval tzv. magnetoštruktúrne D-korelácie v podobe závislosti parametra magnetickej anizotropie od štruktúrnej distorzie. Tieto korelácie, najprv teoreticky predpovedané a následne experimentálne potvrdené, umožňujú racionálny dizajn jednomolekulových magnetov so želanými vlastnosťami.

V čom je praktický význam magnetických javov?

Magnetické javy a ich nositele – teda magnety – poznáme z každodenného praktického života. Každý už videl malú magnetku pritláčajúcu na kovovú nástenku nejaký oznam, alebo veľký elektromagnet, ktorý prenáša celý automobil napr. v šrotovisku. Alebo sme videli silný magnet pri vyšetrení magnetickou rezonanciou. Okrem týchto viditeľných magnetov, záznam informácií na magnetickom princípe sa využíval a využíva už celá desaťročia v podobe magnetofónových pások, videopások, magnetických prúžkov, alebo magnetických pamätí v počítačoch.

V čom je podstata jednomolekulových magnetov?

Konvenčné magnetické jednotky vyžadujú prítomnosť pomerne veľkého počtu mikroskopických magnetonositeľov, teda magnetických atómov. Ak chceme ich veľkosť takýchto domén zmenšovať, narážame na fyzikálnu hranicu prítomnosti aspoň miliardy-miliónov, čo je asi desať na pätnástu atómov. Pod touto hranicou konvenčný magnetizmus sa stráca. Takže aby bolo možné konštruovať ďaleko výkonnejšie magnetické záznamové médiá, musíme sa oprieť o iné, pre nás nové fy-

zikálne princípy. Teoreticky je možné magnetickú informáciu zaznamenať do jedinej molekuly, a potom hovoríme o jednomolekulovom magnete. Tieto objekty sa veľkosťou zaraďujú medzi nanočastice, a tak hovoríme tiež o nanomagnetizme.

Kto skúma jednomolekulové magnety a nanomagnety?

Výskum jednomolekulových magnetov vyžaduje koordináciu úsilia veľkého počtu špecialistov – od syntetických a analytických chemikov, chemikov skúmajúcich fyzikálne javy, fyzikov, fyzikov nízkych teplôt, špecialistov na štruktúru materiálov, materiálových inžinierov, mikro- a nanoelektronikov. V Európe sa v ostatnom čase riešili významné a silne integrované paneurópske projekty zamerané na oblasť nanomagnetizmu. To je aj príčinou, prečo v tejto vednej oblasti Európa dominuje nad Japonskom a Spojenými štátmi, ktoré tu zaostávajú zhruba od dvoch do päť rokov.

Aký je váš vklad do tohto druhu výskumu?

Každá výskumná skupina - hovoríme o desiatkach, prípadne o stovkách z celého sveta – prispieva k rozšíreniu poznania v oblasti nanomagnetizmu svojím dielom. Náš vklad spočíva vo výskume magnetickej anizotropie na molekulovej úrovni. Anizotropiou sa tu myslí rôzna magnetická odozva v rôznych smeroch. V krátkom časovom horizonte sme syntetizovali sériu koordinačných zlúčenín prechodných kovov, menovite niklu a kobaltu, ktorá poslúžila na modelovanie vzťahu štruktúra – magnetická anizotropia. Paralelne s experimentálnou prácou sme dokázali teoreticky formulovať a predpovedať magnetoštruktúrne korelácie uvedeného druhu, ktoré umožňujú predpovedať magnetickú anizotropiu. Tieto návody nám slúžia na racionálne, cieľavedomé „konštruovanie“ molekúl, teda navrhovanie molekulovej architektúry tak, aby sme dostali želané magnetické vlastnosti. Tieto výsledky sme v ostatnom období publikovali v renomovaných vedeckých časopisoch.

Načo nám poslúžia jednomolekulové magnety resp. nanomagnety?

Bolo vy určite obohatením nášho života mať v mobilnom telefóne, ktorý je stále viac multimediálnym komunikátorom, podstatne väčšiu pamäťovú kapacitu. Hovorím a navýšení faktorom miliardu-krát. To by znamenalo možnosť nosiť so sebou dáta nevýdaných rozmerov, napr. všetky knihy, učebnice, noviny, časopisy, brožúry, ale aj filmy a programy, o ktoré mám záujem, alebo potenciálny záujem. Teda z naládovanej ponuky si na ľubovoľnom mieste môžem vybrať to, čo ma práve zaujíma, bez potreby takého dáta zdĺhavo downloadovať. Je tu totiž nebezpečie, že keď 7 miliárd užívateľov začne downloadovať dáta obdobného rozsahu, v éteri bude veľký komunikačný smog. Preto možno dôjde k zriadeniu dokovacích staníc, niečo ako dnešné čerpacie stanice pohonných hmôt, kde si informácie predpokladaného rozsahu a obsahu do komunikátora natiahnem. No a k tomu potrebujeme navýšiť jeho pamäťovú kapacitu spomínaným faktorom miliardu-krát. Jednomolekulové magnety a nanomagnety dávajú reálnu šancu takýmto víziám.

Kde sa ešte dajú prakticky využiť výsledky výskumu molekulového magnetizmu?

Existuje viacero oblastí využitia, napr. ako nových zobrazovacích jednotiek, kde obraz zostáva zachovaný aj bez permanentného elektrického príkonu. Nové možnosti dávajú kombinácie elektroniky s magnetizmom v podobe tzv. spintroniky. Nové možnosti existujú v oblasti výpočtovej techniky, tzv. kvantových počítačoch s neuveriteľnou rýchlosťou. To umožní spracovanie a vyhodnotenie obrovských dátových súborov, čo neumožňujú súčasné technológie.

Kde sa môže mladý človek pripojiť k takémuto druhu vedeckého bádania?

Kvalita našich univerzít v Slovenskej republike neustále rastie a znesie porovnania s obdobnými ustanovizňami v susediacich štátoch. Disponujeme vyškolenými odborníkmi, vedcami a pedagógmi, univerzitnými profesormi, ktorí dokážu školiť študentov už od počiatkoch ich vedeckej dráhy v rámci Študentskej vedeckej činnosti, cez bakalárske, diplomové a rigorózne práce, až po stupeň PhD – teda doktora filozofie. To sa rovnako týka pracovísk Slovenskej akadémie vied. Veda na Slovenku nie je slovenská, je to prinajmenšom európska veda. Je tak veľká, ako veľká je Európa. Svedčí o tom začlenenie našich výskumných kolektívov do európskych výskumných projektov a vedeckých štruktúr, prezentácia výsledkov v európskych vedeckých časopisoch, vydávanie kníh v európskych či svetových vydavateľstvách, prezentácia na európskych konferenciách, paneurópska mobilita. Toto je dobrá značka.

Čo by Ste odkázali mladej generácii?

Veda a technológie sú to, čo predstavuje progres, pokrok, uľahčenie a zlepšenie kvality života. A toto je výzva pre našu mladú generáciu. Len samotná veda alebo len samotná technológia neprinesú žiadané tempo rastu. Len veda v spojení s technológiou, ich symbióza je zárukou pokroku. Mysliac si, že v mojom veku už môžem, apelujem na našich mladých vedcov: bádajte a hľadajte využitie vášho bádania. Nebojte sa hľadať mecénov a trebárs im sľubujte, že vyrobíte zlato z olova, či z ortuti. Hoci tento alchymystický sen sa nikdy nepodarilo splniť, lebo sa to nedá, jednako vzniklo z neho niečo omnoho cennejšie – moderná chémia. Nebojte sa bádania, krokov do neznáma. Príroda čaká na vaše objavovanie. Veď všade okolo nás sú supravodiče, jednomolekulové magnety, q-bity, či iné prevratné objekty, len o nich zatiaľ nevieme. A možno zajtra, alebo pozajtra, sa nad našou nevedomosťou zasmejeme.

V. Milata

Jednoduché zlúčeniny bóru na laboratórnych cvičeniach z anorganickej chémie

2. časť

Téma

Príprava a vlastnosti kyselín, vylučovacie reakcie.

Cieľ

Príprava kyseliny trihydrogenboritej a ilustrácia vylučovacích reakcií slabých a prchavých kyselín. Využitie rozpúšťania, filtrácie a sušenia.

Úlohy na domácu prípravu

1. Podľa chemickej rovnice vypočítajte objem HNO_3(aq) (w = 65 %) potrebný na reakciu s 3,0 g $Na_2[B_2(O2)_2(OH)_4]\cdot 6H_2O$(s) a hmotnosť H_3BO_3(s), ktorá vznikne v priebehu reakcie. Vypočítajte objem vody potrebný na prípravu roztoku $Na_2[B_2(O_2)_2(OH)_4]\cdot 6H_2O$(s) ($w$ = 12 %).

2. Zopakujte si Lewisovu teóriu kyselín a zásad. Napíšte chemickú rovnicu reakcie kyseliny trihydrogenboritej s vodou, ak viete, že kyselina trihydrogenboritá s vodou reaguje ako Lewisova kyselina.

3. Zoraďte kyseliny H_3BO_3, $HClO_3$, $HClO_4$, H_3PO_4, H_2SO_4 od najsilnejšej po najslabšiu bez použitia tabuliek. Uveďte, aká veličina sa používa na vyjadrenie sily kyselín.

4. Zistite vlastnosti látok používaných pri nasledujúcej syntéze z hľadiska rizika a bezpečnosti práce v kartách bezpečnostných údajov.[1]

Princíp syntézy

Vylučovacia reakcia medzi vodným roztokom tetrahydroxido-diperoxidodiboritanu disodného a koncentrovaným vodným roztokom kyseliny dusičnej.

Celková chemická rovnica

$Na_2[B_2(O_2)_2(OH)_4]\cdot 6H_2O(s) + 2HNO_3(aq) \rightarrow$
$\rightarrow 2H_3BO_3(s) + 2NaNO_3(aq) + 2H_2O_2(aq) + 4H_2O(l)$

Charakteristika produktu

Kyselina trihydrogenboritá je biela kryštalická látka. Jej rozpustnosť vo vode je závislá od teploty. V roztoku sa správa sa ako slabá jednosýtna Lewisova kyselina. Jej 3 % vodný roztok sa v lekárstve používa ako antiseptikum. Pred niekoľkými rokmi začali predajcovia upozorňovať, že kyselina trihydrogenboritá (podobne ako iné zlúčeniny bóru) môže ohroziť plodnosť, preto treba pri práci s ňou dodržiavať bezpečnostné opatrenia.

Pomôcky

Predvažovacie váhy, kadička (50 cm3), odmerný valec (10 cm3), pipeta (5 cm3), pipetovací nástavec, lyžička, sklená tyčinka, odsávacia banka, gumová manžeta, Büchnerov lievik, výveva, špachtľa, ľad s miskou na ľadový kúpeľ, filtračný papier, nožnice, hodinové sklíčko (veľkosť zodpovedajúca filtračnému papieru do Büchnerovho lievika).

Chemikálie

HNO_3(aq) (w = 65 %),
$Na_2[B_2(O_2)_2(OH)_4]\cdot 6H_2O$(s), destilovaná voda, ľad, ľadová destilovaná voda.

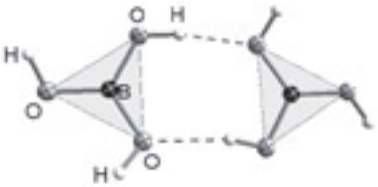
Postup prípravy

Odvážte 3,0 g $Na_2[B_2(O_2)_2(OH)_4]\cdot 6H_2O$ a v kadičke z neho pripravte vodný roztok (w = 12 %). V digestore následne pipetou pomaly pridajte potrebné množstvo HNO_3(aq) (w = 65 %), sústavu umiestnite na 30 min do ľadového kúpeľa a dôkladne premiešajte. Počas chladenia pripravte aparatúru na odsatie vylúčených kryštálov H_3BO_3. Vzniknuté kryštály odsajte na Büchnerovom lieviku, premyte ich ľadovou vodou, vysušte voľne na vzduchu, odvážte a vypočítajte relatívny výťažok.

Otázky a úlohy

1. V diskusnej časti protokolu uveďte a zdôvodnite príčiny odchýlky hmotnosti reálneho výťažku od predpokladanej teoretickej hodnoty.

2. Kyselina trihydrogenboritá má v kryštalickom stave vrstevnatú štruktúru. Molekuly sú vo vrstvách navzájom pútané interakciami znázornenými na obr. 1 prerušovanou čiarou. Ako tieto interakcie nazývame?



Obr. 1 Interakcia molekúl H3BO3 v kryštálovej štruktúre.[2]

Správne odpovede na úlohy domácej prípravy:

1.
Objem 65 % HNO_3: 1,4 mL.
Príprava 12 % roztoku $Na_2[B_2(O_2)_2(OH)_4]\cdot 6H_2O$: 3,0 g látky a 22 mL vody.
Hmotnosť produktu: 1,2 g H_3BO_3.

2.
$H_3BO_3 + 2H_2O \rightarrow [B(OH)_4]^- + H_3O^+$.

3.
Rad kyselín od najsilnejšej po najslabšiu: $HClO_4 > HClO_3 \rightarrow H_2SO_4 > H_3PO_4 > H_3BO_3$ (na základe počtu atómov vodíka a kyslíka).[3] Na vyjadrenie sily kyselín sa používa konštanta kyslosti.

4.
Podľa kariet bezpečnostných údajov.

Správne odpovede na otázky a úlohy:

1.
Odpoveď je rovnaká ako pri predchádzajúcej syntetickej úlohe.[4]

2.
Interakcie medzi molekulami kyseliny trihydrogenboritej sa nazývajú vodíkové mostíky (vodíkové väzby).

Záver

Uvedené laboratórne úlohy sme sa snažili koncipovať tak, aby študentov podnecovali k samostatnosti, tvorivosti a dôkladnej príprave, kládli minimálne nároky na finančné pokrytie ich realizácie a zabránili hromadeniu ďalej nepoužiteľných produktov. Zároveň sme sa snažili o vytvorenie úloh, ktorých uskutočnenie si vyžiada minimálne časové nároky. Napokon dúfame, že tieto texty prispejú k zvýšeniu efektivity vyučovacieho procesu.

Literatúra

1. Karty bezpečnostných údajov možno nájsť na internete, napr. www.sigmaaldrich.com/slovakia.html, www.merckmillipore.sk.

2. Kryštálová štruktúra jednej z modifikácií H3BO3 bola publikovaná v článku: Shuvalov, R. R., Burns, P. C.: Acta Crystallogr., Sect. C, 59, 2003, i47.

3. Napr. Fajnor, V., Schwendt, P., Tatiersky, J.: Všeobecná a anorganická chémia pre biológov. 1. vyd. Bratislava : UK, 2011, s. 83.

4. Meluš, M., Tatiersky, J.: ChemZi, 7/13, 2011, 26 – 27.

M. Meluš, J. Tatiersky

Požiarna bezpečnosť pri manipulácii s horľavými kvapalinami v laboratóriu

Mária Porubská
UKF v Nitre, FPV, Katedra chémie
Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra
mporubska@ukf.sk

Iba máloktoré univerzitné, akademické a prevádzkové chemické laboratórium pri svojej práci nepoužíva žiadne organické rozpúšťadlo. Tieto sú až na ojedinelé prípady horľavé.

Kritériom miery horľavosti je **bod vzplanutia**. Definovaný je ako najnižšia teplota, pri ktorej horľavá kvapalná látka za presne stanovených podmienok skúšky vyvíja také množstvo horľavých pár, ktoré je po priblížení iniciačného zdroja (plameň alebo iskra) schopné vzplanúť, maximálne 5 sekúnd horieť a potom zase zhasnú [1, 2 ai.]. Čím je teplota vzplanutia nižšia, tým je horľavá kvapalina požiarne nebezpečnejšia. Na základe bodu vzplanutia legislatíva [1] zatriďuje horľavé kvapaliny do 4 tried nebezpečnosti (tab. 1).

Trieda nebezpečnosti	Bod vzplanutia (°C)
I.	do 21
II.	nad 21 do 55
III.	nad 55 do 100
IV.	nad 100 do 250

Vyhláška [1] definuje aj *horľavé kvapaliny s nízkym bodom varu*. Takou sa rozumie horľavá kvapalina, ktorá má okrem teploty vzplanutia najviac 21° C súčasne teplotu varu najviac 50°C. Ak prepravný obal takejto kvapaliny nemá etiketu podľa vykonávacích predpisov k chemickému zákonu [3], musí byť opatrený nápisom HORĽAVÁ KVAPALINA S NÍZKYM BODOM VARU. Obal môže byť naplnený najviac na 90 % jeho nominálneho objemu. Horľavá kvapalina všeobecne môže byť v rozbitnom prepravnom obale, ktorý má objem najviac 5 l. Avšak na horľavé kvapaliny s nízkym bodom varu sa môže použiť rozbitný prepravný obal (sklená fľaša) s objemom najviac 1 l. Ak sa použijú obaly z plastov alebo gumy, musia spĺňať požiadavku, aby povrchový odpor materiálu obalu bol menší ako 109 Ω, zhoda musí byť posúdená autorizovanou osobou a podľa technickej dokumentácie sú určené na umiestňovanie horľavých kvapalín I. alebo II. triedy nebezpečnosti. V prípade kvapalín I. a II. triedy nebezpečnosti musí byť jej prepravný obal chránený proti tepelným účinkom slnečného žiarenia. Plný prepravný obal musí byť uzatvorený a uložený vždy plniacim otvorom nahor. Táto požiadavka sa vzťahuje aj na prázdny prepravný obal, ktorý nebol zbavený zvyškov horľavých kvapalín.

Najväčší objem horľavých kvapalín, ktorý možno ukladať alebo používať v požiarnom úseku pracoviska, uvádza tab. 2, z toho horľavých kvapalín I. triedy nebezpečnosti môže byť najviac 20 %. Horľavé kvapaliny s nízkym bodom varu sa nesmú ukladať v zhromažďovacom priestore pracoviska a v únikových cestách stavebne oddelených od iných priestorov.

Priestor v m²	Najväčší objem horľavých kvapalín všetkých tried nebezpečnosti v m³			
	do 100	nad 100 do 500	nad 500 do 1000	nad 1000
Pracovisko	0,05; z toho 0,01 kvapalín I. triedy nebez-pečnosti	0,1; z toho 0,02 kvapalín I. triedy nebezpečnosti	0,2; z toho 0,04 kvapalín I. triedy nebezpečnosti	0,5; z toho 0,1 kvapalín I. triedy nebez-pečnosti

Tab. 2 Najväčší objem horľavých kvapalín všetkých tried nebezpečnosti, povolený ukladať alebo používať v požiarnom úseku pracoviska

Pracovisko, na ktorom sú horľavé kvapaliny I. a II. triedy nebezpečnosti, musia sa vetrať prirodzeným alebo núteným vetraním. V prípade núteného vetrania (najmenej dvojnásobná výmena vzduchu za hodinu) musí byť ventilátor určený na prevádzku v prostredí s nebezpečenstvom výbuchu.

Na pracovisku, kde sa manipuluje s horľavými kvapalinami, nesmie sa fajčiť ani používať otvorený oheň. Na vstupných dverách musí byť umiestnená značka ZÁKAZ FAJČENIA A VSTUPU S OTVORENÝM OHŇOM a označenie príslušného priestoru [4].

Na odstraňovanie rozliatych horľavých kvapalín sa môže používať iba vhodný nehorľavý absorpčný materiál, aby pri jeho nasiaknutí rozliatou horľavinou nedošlo k samovznieteniu. Najjednoduchší prostriedok je piesok, ktorý by mal byť vo vhodnej nádobe pripravený v každom laboratóriu pracujúcom s horľavými rozpúšťadlami. Môžu sa použiť aj iné absorbenty ako Vapex, perlit alebo piliny. Rozliata kvapalina sa jednoducho zasype takým množstvom absorbujúceho materiálu, aby všetka vsiakla a potom sa nasýtený absorbent mechanicky pozbiera (lopatkou, metlou), uloží do uzatvorenej nehorľavej nádoby a uloží na určené miesto na bezpečnú likvidáciu. Rovnako na odkladanie čistiacich textílií zaolejovaných súčiastok (populárne nazývaných puzvol), horľavých zvyškov a obdobných materiálov má byť na pracovisku pripravená plnostenová nádoba z nehorľavého materiálu so zatvárateľným vekom. Táto sa má z pracoviska denne odstraňovať a tiež ukladať na určené miesto.

Laboratóriá majú často príručné sklady rozpúšťadiel, aby sa priamo v laboratóriu neakumulovalo zbytočne veľa chemikálií. Legislatíva definuje príručný sklad horľavých kvapalín ako sklad, v ktorom je uložených najviac 7 m³ horľavých kvapalín všetkých tried nebezpečnosti. V príručnom sklade horľavých kvapalín možno skladovať najviac 0,2 m3 horľavých kvapalín s nízkym bodom varu, a to oddelene od ostatných horľavých kvapalín.

Je samozrejmé, že priestory, kde sa manipuluje s horľavými kvapalinami (príručný sklad, pracovisko) majú byť vybavené hasiacimi prostriedkami (funkčný hydrant, funkčné a pravidelne kontrolované hasiace prístroje), požiarnou signalizáciou a pohotovostnými komunikačnými prostriedkami. Tieto podrobnosti by mal definovať požiarny poriadok pracoviska.

Referencie:

Vyhláška Ministerstva vnútra SR č.96/2004 Z.z., ktorou sa ustanovujú zásady protipožiarnej bezpečnosti pri manipulácii a skladovaní horľavých kvapalín, ťažkých vykurovacích olejov a rastlinných a živočíšnych tukov a olejov.

STN EN ISO 13736 Ropné výrobky a iné kvapaliny. Stanovenie bodu vzplanutia. Metóda uzavretého téglika podľa Abela.

Zákon č.67/2010 Z.z. o podmienkach uvedenia chemických látok a chemických zmesí na trh a o zmene a doplnení niektorých zákonov (chemický zákon).

Zákon č. 314/2001 Z.z. o ochrane pred požiarmi v znení zákona č.199/2009 Z.z. , ktorým sa mení a dopĺňa zákon č. 314/2001 Z. z. o ochrane pred požiarmi v znení neskorších predpisov a o zmene a doplnení niektorých zákonov.

ČAS NA ZMENU

„Asociácia dodávateľov liekov a zdravotníckych pomôcok pôsobí na Slovensku už 20 rokov. V súčasnosti združuje 131 farmaceutických spoločností, distribučných spoločností a majiteľov lekární a jej hlavným cieľom je presadzovať a chrániť záujmy členov tak, aby zdravotný systém bol transaprentný, predvídateľný a aby boli lieky dostupné pre slovenských pacientov. Na tému „Čo nové v liekovej politike?“ sme sa porozprávali s prezidentom Asociácie dodávateľov liekov a zdravotníckych pomôcok (ADL) MUDr. Igorom NOVÁKOM, MPH.

Pán prezident, ministerstvo zdravotníctva v minulom roku presadilo a parlament prijal dva nové zdravotnícke zákony, ktoré zásadne zmenili fungovanie liekového reťazca. Ako vníma ADL tieto zákony?

Dobré zákony vznikajú, ak sa pri ich príprave umožní široká diskusia. To v prípade zákona o lieku bohužiaľ neplatilo, čo už prinieslo v praxi následky. Komunikácia nám veľmi chýbala a myslím, že takto to pociťujú všetci, ktorých sa zákon dotýka. Čo sa týka zákona o rozsahu, tu sa aspoň vďaka pozmeňovacím poslaneckým návrhom podarilo zvrátiť hrozbu nedostupnosti inovatívnych moderných liekov na Slovensku. Hrozilo oneskorenie ich príchodu o 1 až 1 a pol roka, čo v preklade znamená, že stovky pacientov by nedostali liečbu, často život predlžujúcu, prípadne zachraňujúcu, z ktorej v tom istom čase môžu profitovať v iných štátoch Európskej únie.

Veľa sa v priebehu prípravy zákonov hovorilo a písalo o korupcii v zdravotníctve, o indukovanej preskripcii. Aký je názor ADL na túto prolematiku? Budete sa snažiť s novým vedením ministerstva zdravotnictva komunikovať aj na túto tému?

V blízkej budúcnosti by sme v rámci konštruktívnej diskusie s ministerstvom zdravotnictva určite radi otvorili aj túto tému. O tejto téme sa naozaj veľa písalo a trochu ma mrzí, že sa veľmi často informovalo neobjektívne bez vysvetlenia faktov. Hovorí sa o údajnom korupčnom správaní farmaceutických spoločností, ale nehovorí sa už o tom, že bez ohľadu na zmeny, ktoré boli prijaté, lieková politika bola vždy veľmi prísne regulovaná štátom. Samotná registrácia nového lieku je v drvivej väčšine prípadov riadená centrálne, čo znamená, že nový liek získa povolenie na vstup od Európskej liekovej agentúry. Ani cena lieku sa nemôže stanoviť ľubovoľne a doplatok taktiež určuje kategorizačná komisia a nie farmaceutická spoločnosť. Samotné promočné aktivity sú prísne regulované ako zákonom o reklame, tak aj Etickým kódexom farmaceutického priemyslu na Slovensku. Obe tieto normy zabraňujú korupčným praktikám. Oproti pôvodnému zneniu zákona je asi najvýraznejší rozdiel v tom, že medicínski reprezentanti nemôžu navštrevovať lekárov počas ordinačných hodín ak chcú informovať o liekoch. Nemyslím, si, že v minulosti lekári uprednostňovali reprezentantov ak mali plnú čakáreň pacientov. Farmaceutické spoločnosti sprostredkovávajú zdravotníckym pracovníkom vzdelávanie, ktoré je povinne celoživotné. Ak sa teda rozprávame o úlohách farmaceutických spoločností je potrebné tiež povedať, že toto povinné vzdelávanie je vzhľadom na nedostatok zdrojov zabezpečované takmer výlučne z edukačných grantov farmaceutických spoločností.

Od 1. decembra 2011 platí podmienka, že cena liekov na Slovensku musí byť na úrovni druhej najnižšej v Európskej únii. Napĺňajú sa predpoklady, že toto opatrenie zabezpečí šetrenie deklarovaných desiatok miliónov eur a to bez prípadných negatívnych dopadov na dostupnosť liekov pre slovenských pacientov?

V prvom rade si treba uvedomiť, že týmto opatrením nastala situácia, keď v 25 štátoch Európskej únie sú lieky drahšie ako na Slovensku. Z tejto zmeny logicky vyplynul zvýšený záujem o naše lacné lieky. Od začiatku nastavenia ceny liekov na druhú najnižšiu cenu v rámci EÚ, sme upozorňovali na to, že sa týmto spôsobom otvoria dvere pre biznis subjektov, orientujúcich sa na reexport liekov. Dnes sa na jednej strane stal z liekov absolútne nekontrolovateľný atraktívny vývozný artikel, kedy nikto nikomu nemusí hlásiť, kde a v akom množstve lieky vyváža, na strane druhej, ako už bolo aj medializované, niektoré lieky v dôsledku reexportu začínajú doma chýbať a stávajú sa nedostatkovým tovarom pre bežných ľudí. Paradoxne tento stav je v zákone ošetrený len sankčne. V prípade, ak nastane situácia, že liek nebude 60 dní na trhu, MZ ho vyradí zo zoznamu a môže udeliť výrobcovi pokutu. Dochádza tak k paradoxnej situácii, kedy výrobca má byť potrestaný za to, že síce dodávku lieku na slovenský trh zabezpečí v dostatočnom množstve, ale iný subjekt, ktorý ma povolenie na distribúciu však tento liek vyvezie a bude ho u nás nedostatok.

Dôsledkom bude zvýšený vývoz týchto liekov, čo môže spôsobiť ich nedostupnosť pre slovenského pacienta. ADL navrhovala, aby vývozcovia mali povinnosť notifikovať vývoz liekov, čo by jednak pomohlo presne určiť aké množstvo liekov opúšťa Slovensko a taktiež odlíšiť prípadnú nedostupnosť spôsobenú výrobcom od nedostupnosti, ktorá vznikla vývozom zo Slovenska. Bohužiaľ, táto naša pripomienka nebola bývalým vedením ministerstva zdravotníctva akceptovaná.

Ako to vyzerá so spotrebou liekov na Slovensku? Vraj máme oveľa vyššiu spotrebu ako okolité krajiny.

Spotreba liekov na Slovensku už niekoľko rokov nerastie tak rýchlo ako tomu bolo v minulosti. Krivka rastu je plochá. Ak sa pozrieme percentuálne na výdavky na lieky z rozpočtu Ministerstva zdravotníctva, vyzerá to, že naša spotreba liekov je vysoká, ale je to aj vďaka tomu, že náš rozpočet je poddimenzovaný, nakoľko podiel investícií do zdravotníctva a taktiež aj platy zdravotníckych pracovníkov sú nižšie ako v ostatných krajinách EÚ. Naši experti v ADL urobili v uplynulých mesiacoch vlastné prepočty, vychádzajúc z vlastných, ale i európskych štatistík. Podľa údajov z IMS Health a NCZI za 3 roky (2008-2011) klesla priemerná cena výrobcu lieku za deň terapie o 6%, napriek tomu celkové doplatky pacientov za toto 3-ročné obdobie vzrástli o 14%. Náklady zdravotných poisťovní na lieky sa pritom v roku 2011 oproti roku 2008 výrazne nezmenili. „Je to zarážajúce najmä ak vezmeme do úvahy, že slovenské domácnosti hotovostne financujú zdravotníctvo až vo výške 25%. V ostatných krajinách EÚ je to pritom priemerne len okolo 18%. Vlani slovenskí pacienti doplácali na lieky okolo 170 mil. eur, v tomto roku by táto suma mohla dosiahnuť takmer 200 mil. eur. Podľa našich prepočtov, vyhláška MZ platiaca od novembra 2011 bude mať z tejto sumy na svedomí asi 23 mil. EUR. Suma sumárum tak pacienti pocítia dopad vyhlášky o podporenej a doplnkovej liečbe priamo v podobe navýšenia doplatkov, a to vo výške 12 mil. EUR ročne. Z globálneho pohľadu platia v rámci Európy viac už len Portugalci. Tento názor nepriamo potvrdila v polovici mája aj Národná banka Slovenska, ktorá vo svojej správe uviedla, že na Slovensku došlo k zdraženiu regulovaných cien liekov v dôsledku novej kategorizácie. Len v mesiaci apríl sa podľa NBS zvýšili ceny liekov predpísaných lekármi o takmer 11%. To sú fakty, o ktorých je potrebné začať diskutovať, protože priamo ohrozujú efektivnost a kvalitu poskytovanej liečby, ktorá sa neustálym zvyšovaním doplatkov stáva nedostupnou pre bežného pacienta.

Veľa sa v procese prípravy a schvaľovania hovorilo o transparennosti celého procesu cenotvorby a úhradového systému. Zmenami tak prešiel aj samotný proces kategorizácie liekov. Prejavili sa tieto zmeny nejakým spôsobom aj v praxi?

Z nášho pohľadu zmeny v nastavení procesu kategorizácie nemôžeme vnímať ako transparentné, teda pozitivne. Zasadnutia kategorizačnej komisie ako aj Rady sú neverejné. Účastníkmi konania sú len poisťovne a farmaceutické spoločnosti, a tí, ktorých sa proces najviac týka - pacienti aj lekári – sú z tohto konania vylúčení. Súčasné percentuálne zloženie komisie, poisťovne vs odborníci nedáva možnosť odbornej verejnosti prehlasovať názor zdravotných poisťovní, ktoré majú v tomto procese najväčšiu silu. Je na mieste obava, že rozhodnutia nemusia byť prijímané vždy v prospech pacienta, keďže poisťovňa ako tvorca zisku si bude chrániť svoje záujmy, t.j. zisk. Ideálne by bolo, ak by rozhodovala nezávislá komisia odborníkov, prípadne nezávislý regulátor. Tiež účasť pacientov na zasadaniach komisie, tak ako je to v mnohých krajinách, by mohlo pomôcť k skvalitneniu celého procesu.

Zaujímavé tiež je, že sa na verejnosti veľmi nehovorí ani o ďalšej „novinke“, ktorú zmeny v kategorizačnom procese priniesli. Ministerstvo zdravotníctva na základe Zákona o rozsahu a podmienkach úhrady liekov, zdravotníckych pomôcok a dietetických potravín na základe verejného zdravotného poistenia, v konečnom dôsledku nemusí brať pri rozhodovaní do úvahy ani odporúčania Kategorizačnej komisie, čím sa moc koncentruje do jediných rúk. V uplynulom období skutočne chýbal priestor na otvorenú odbornú diskusiu. Jasným príkladom, kde na nedostatok komunikácie zákon doplatil je napríklad oblasť klinického skúšania. Farmaceutické spoločnosti investujú na Slovensku ročne desiatky miliónov eur a umožňujú pacientom liečiť sa tou najmodernejšou liečbou. Nové znenie zákona však tento benefit pre pacientov značne limituje. Dúfame, že sa nám podarí situáciu čoskoro vyriešiť, pretože z klinického skúšania neprofitujú len pacienti, ale aj štát.

Vzhľadom na všetky uvedené problémy Asociácia dodávateľov liekov a zdravotníckych pomôcok víta, že ministerka zdravotnictva deklarovala snahu diskutovať o zmenách, ktoré by mohli byť prínosom pre všetky zainteresované strany a prisľúbila, že podporí zmysluplné legislativne zmeny. V uplynulom období ADL verejne kritizovala absenciu systematickej a otvorenej komunikácie. Programové vyhlásenie vlády v oblasti zdravotníctva hovorí o tom, že by sa táto diskusia mohla opätovne naštartovať k prospechu všetkých zainteresovaných strán. A v tomto prípade, ak hovorím všetkých, tak nehovorím v prospech niekoľkých úradníkov, ale všetkých občanov Slovenska, ktorých sa každé jedno rozhodnutie v oblasti zdravotníctva bezprostredne dotýka. V čase, keď dodávatelia liekov a zdravotníckych pomôcok úverujú nemocnice aj 400 dní po splatnosti faktúr, oceňujeme deklarovanie snahy sprísniť kontrolu hospodárenia nemocníc a tiež iniciatívu hľadať zdroje dofinancovania výpadkov vyplývajúcich zo zníženia platieb za poistencov štátu. ADL považuje za najdôležitejšie v tejto chvíli zmenu pravidiel v kategorizácií liekov a prehodnotenie systému tzv. clustrovnia. Dúfame, že sa ministerstvu zdravotníctva podarí prijať také opatrenia, ktoré odvrátia hrozbu vysokých doplatkov pre pacientov. Samozrejme existuje množstvo ďalších oblastí, o ktorých je potrebné diskutovať a hľadať riešenia, ktoré sprehľadnia situáciu medzi výrobcami, distribučnými spoločnosťami, zdravotníckymi pracovníkmi, ale aj samotným ministerstvom. ADL je zasa na druhej strane pripravená okamžite podporiť a napomôcť pri realizácií všetkých zmysluplných opatrení ministerstva, ktoré prinesú upokojenie aktuálnej situácie v slovenskom zdravotníctve.

Asociácia dodávateľov liekov a zdravotníckych pomôcok
Heydukova 1
811 08 Bratislava
tel./fax: +421 2 52631188, 87
www.adl.sk, email: adl@adl.sk

K životnému jubileu doc. RNDr. Oľgy Hritzovej, CSc.

V marci roku 2012 oslávila svoje okrúhle životné jubileum - 70 rokov - naša kolegyňa, docentka RNDr. Oľga Hritzová, CSc. Je to milá príležitosť pripomenúť si niektoré významné medzníky v jej živote a súčasne sa jej aspoň takto poďakovať za všetko to dobré a užitočné, čo pre rozvoj fakulty, spolupracovníkov, študentov a priateľov vykonala ako veľmi usilovná, spoľahlivá a vždy láskavá kolegyňa.

Narodila sa v Prešove a po ukončení stredoškolského štúdia v Ružomberku, začala študovať na Prírodovedeckej fakulte Univerzity Komenského v Bratislave, odbor organická chémia. Po úspešnom absolvovaní vysokoškolského štúdia nastúpila 1. augusta 1965 na Katedru chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity P. J. Šafárika v Košiciach. Od samého vzniku Katedry organickej chémie na PF UPJŠ v Košiciach (1.2.1966) pracovala na tejto katedre až do svojho odchodu do dôchodku (31.8.2007), t.j. 42 rokov, najprv ako asistentka, potom ako odborná asistentka a od r. 1988 ako docentka. V r. 1968 obhájila rigoróznu prácu na PriF UK v Bratislave a získala vedeckú hodnosť RNDr. V rámci externej ašpirantúry obhájila v r. 1978 kandidátsku dizertačnú prácu tiež na PriF UK v Bratislave. Následne po prednesení habilitačnej prednášky na tému „Vodíková väzba – dôležitý fenomén živej a neživej prírody“ a obhajobe habilitačnej práce „Využitie infračervenej spektroskopie pri riešení štruktúry, stereochémie a reaktivity organických látok“, získala vedecko-pedagogickú hodnosť docentky vo vednom odbore organická chémia.

V súčasnosti svoje skúsenosti z oblasti chémie odovzdáva na Katedre enviromentalistiky Strojníckej fakulty Technickej univerzity v Košiciach ako externý učiteľ, kde pomáha pri príprave inžinierov pre oblasť ochrany životného prostredia.

V rámci svojej vedecko-pedagogickej činnosti sa venovala organickej chémii, metódam určovania štruktúry chemických zlúčenín a informačným systémom v chémii. Na fakulte pracovala v rôznych komisiách: pre štátne záverečné skúšky, pre rigorózne skúšky, pre ŠVOČ a SOČ, pre chemickú olympiádu a pod. Odchovala viac ako 50 diplomantov. Podieľala sa na výchove doktorandov všetkých chemických katedier. Aj v rámci Československa pracovala ako konzultantka na niekoľkých chemických a biochemických katedrách, najmä pri zavedení nových experimentálnych metodík v IČ spektroskopii. Za svoju pedagogickú prácu dostala aj niekoľko pochvalných uznaní.

Vedecko-výskumná činnosť doc. Hritzovej bola orientovaná najprv na štúdium syntézy, štruktúry a reakcií izotiokyanátov, ako aj syntézy heterocyklov na báze heterokumulénov. V rámci riešenia grantových projektov VEGA, v spolupráci s Prírodovedeckou fakultou UK v Bratislave, sa venovala štúdiu vzťahov medzi štruktúrou, reaktivitou a spektrálnymi vlastnosťami polárnych molekúl, ako aj ich interakcie s chemickým okolím. Okrem toho sa zaoberala aj problematikou využitia infračervenej spektroskopie pri riešení štruktúry, stereochémie a reaktivity ďalších organických látok (vodíkové väzby, Fermiho rezonancia, solvent efekt) a korelačnej analýze fyzikálno-chemických vlastností látok. Je autorkou, resp. spoluautorkou 45 pôvodných vedeckých prác v karentovaných časopisoch, ktoré sú viac ako 80-krát citované v renomovaných medzinárodných citačných databázach. Svoje výsledky vedeckej práce aktívne prezentovala na mnohých domácich a medzinárodných konferenciách. Podieľala sa na organizovaní domácich i medzinárodných konferencií a sympózií. Spolupracovala s viacerými vedeckými pracoviskami nielen u nás, ale aj v zahraničí. Vedecká aktivita a významné výsledky jej práce boli dosiahnuté v rámci projektov VEGA, projektov Ministerstva školstva SR a SAV, ako aj inštitucionálnych projektov.

Doc. Hritzová je členkou Slovenskej chemickej spoločnosti pri SAV od r. 1973. Rovnako bola členkou Českej chemickej spoločnosti a Slovenskej spektroskopickej spoločnosti. V rokoch 1990 - 2007 bola predsedníčkou Odbornej skupiny pre organickú chémiu vo Východoslovenskej pobočke SCHS na PF UPJŠ v Košiciach. Pôsobila aj ako člen rozšíreného výboru SCHS v Bratislave. Svojou aktívnou činnosťou v SCHS prispela k rozvoju chémie, k šíreniu najnovších poznatkov v organickej chémii a ich uplatňovaniu v praxi. Slovenská chemická spoločnosť viackrát ocenila jej aktívnu prácu pre rozvoj chemických vied medailou, a to v rokoch 1992, 1997, 2000. Bola tiež členkou komisie pre edičnú činnosť na PF UPJŠ a členkou Edičnej rady UPJŠ za Prírodovedeckú fakultu. Od roku 2006 je aktívnou členkou Etickej komisie Agentúry na podporu výskumu a vývoja v Bratislave.

Doc. Hritzová sa významne zapísala do povedomia slovenskej a českej komunity v oblasti organickej chémie.

Prajeme Doc. Hritzovej v mene mnohých slovenských a českých chemikov, kolegov a priateľov všetko najlepšie, pevné zdravie, úspechy v jej ďalšej práci a šťastie v súkromnom živote.

M. Reháková

Jubilantka Prof. Ing. Eva Matisová, DrSc.

Emeritná profesorka Ústavu analytickej chémie FCHPT STU Eva Matisová sa nedávno dožila významného životného jubilea. Narodila sa 25. 3. 1942 v Púchove a školské štúdium absolvovala v Bánovciach nad Bebravou. V r. 1964 získala titul inžinier chémie na Chemickotechnologickej fakulte SVŠT v Bratislave. V rokoch 1964-67 absolvovala študijný pobyt na Virologickom ústave SAV v Bratislave, v rokoch 1967-69 robila výskum v Biovete, n. p. Nitra. Od roku 1969 pracuje na našej fakulte, získala vedeckopedagogické hodnosti CSc. (1978), docent (1985), DrSc. (1997) a profesor (2001). Prof. Matisová absolvovala dlhodobé študijné pobyty na Univerzite vo Viedni (1979), na Yorkskej univerzite v Toronte (1992-93) a na Univerzite v Ulme (1997).

Prof. Matisová je uznávanou vedeckou osobnosťou v odbore Analytická chémia doma aj v zahraničí predovšetkým v oblasti analýzy zložitých organických sústav kapilárnou plynovou chromatografiou a jej kombinácie s hmotnostnou spektrometriou. Vybudovala laboratórium GC-MS a venuje sa stopovej a ultrastopovej analýze prchavých a semiprchavých organických látok v rôznych matriciach vzorky, predovšetkým v potravinách a životnom prostredí. Venuje sa vývoju metód izolácie a obohacovania analytov s následnou GC a GC-MS analýzou. Ďalšou oblasťou jej výskumu je rýchla plynová chromatografia. Bola zodpovednou riešiteľkou medzinárodných (COPERNICUS, NATO, EUREKA) a domácich projektov (5 VEGA a 1 APVV). Rozsiahla je jubilantkina činnosť v oblasti publikačných aktivít. Výsledky výskumu doteraz publikovala v 134 prácach v recenzovaných časopisoch, z toho 109 CC, v 2 kapitolách vo vedeckých monografiách v zahraničí a 265 príspevkoch na vedeckých podujatiach. Osobne predniesla 71 prednášok (z toho 33 na medzinárodných konferenciách a univerzitách v zahraničí). Počet registrovaných citácií podľa SCI má hodnotu 1029.

V rámci výchovno-vzdelávacej a pedagogickej činnosti Prof. Matisová prednášala základné, odborové a špecializačné predmety Analytická chémia II, Separačné metódy, Vybrané metódy separácie a Techniky separácie zmesí. Ako organizačná vedúca laboratórnych cvičení z Inštrumentálnych metód analytických (1980-1982), Analytickej chémie II (1982-1985) a Laboratória od-

boru pre IV. a V. ročník na špecializácii (1985-2003) sa zaslúžila o modernizáciu experimentálnej výučby. Pravidelne prednášala v postgraduálnom štúdiu, na kurzoch a letných školách. Bola vedúcou 11 semestrálnych a bakalárskych projektov a 34 diplomantov. Analýza jej vývoja a dosiahnutých výsledkov ukazuje, že vytvorila vedeckú školu v oblasti štúdia mnohozložkových zmesí kapilárnou GC, rýchlou GC a kombináciou GC-MS. Prof. Matisová vyše štyri desaťročia významne rozvíja na ústave vedný odbor Analytická chémia a to tak nápaditou a pre prax užitočnou vedecko-výskumnou činnosťou ako aj pedagogickou prácou. V rámci tejto školy doteraz vyškolila 10 kandidátov vied a PhD., 2 z nich sú docentami. Je členkou odborovej komisie pre obhajoby doktorských dizertačných prác vo vednom odbore Analytická chémia. Medzinárodným uznaním výsledkov jej práce sú pozvania zahraničných časopisov publikovať prehľadové články a kapitoly v monografiách, pozvané prednášky, ako aj pôsobenie ako recenzentky zahraničných časopisov. Prof. Matisová aktívne pracovala pri organizácii medzinárodných sympózií. Svoju odbornosť uplatnila aj v odbornej skupine Analytická chémia Slovenskej chemickej spoločnosti, ktorej je dlhoročnou členkou.

Pri príležitosti milého životného jubilea si dovoľujeme v mene pracovníkov Ústavu analytickej chémie FCHPT STU a širokej chemickej odbornej verejnosti úprimne popriať pani profesorke do ďalších rokov veľa zdravia, osobného šťastia, rodinnej pohody a dobrý pocit z dlhoročnej úspešnej vedeckej a pedagogickej činnosti. Veríme, že tvorivý elán a pracovná zanietenosť zostanú pre ňu typické aj naďalej.

J. Labuda, S. Hrouzková

Jadrový chemik profesor Pavol Rajec

Pavol Rajec sa narodil 20. 05. 1947 v Kežmarku. S manželkou Alenou majú dve deti Vlada a Ivanu. V tomto roku tento významný, spoločensky i pracovne aktívny pedagóg a vedec Univerzity Komenského v Bratislave dovŕši 65. rok svojho života. Ide o radostné výročie nielen v živote jednotlivca. Pozornosť si právom takáto udalosť zaslúži aj zo strany jeho priateľov, známych a od nás, jeho bývalých študentov, teraz už kolegov.

Od roku 1970 pracuje na Prírodovedeckej fakulte UK ako pedagogicko-vedecký pracovník. Začal pôsobiť na Katedre geochémie a neskôr na Katedre jadrovej chémie PriF UK v rôznych pozíciách. Kde pôsobí dodnes ako funkčný profesor a garant odboru a pracoviska. Výsledky svojej vedeckej činnosti publikoval a doteraz aktívne publikuje v domácich a zahraničných vedeckých časopisoch. Prvú vedeckú prácu publikoval v roku 1974 a venuje sa metóde prípravy a štúdiu vlastností dioxo(8-hydroxychinoláto) technécium (V) chelátu. Dnes sa dá povedať, že rádiofarmaká označené 99mTc sa využívajú pre diagnostické účely v nukleárnej medicíne a oxidačné stupne, ktoré študoval sú najpoužívanejšie pre tvorbu prípravy rádiofarmák. Je autorom a spoluautorom viac než 73 medzinárodných karentovaných časopisoch a viac než 200 ďalších publikácií a abstraktov v zborníkoch z medzinárodných a domácich konferencií. Pod jeho vedením ukončilo 6 PhD študentov a 39 diplomantov. Vo výskume sa zameriava na oblasť jadrovej chémie, rádioekológie a aplikácie rádionuklidových metód v chémii. Rámcovo ho možno zaradiť do nasledovných okruhov:

- dôsledky beta premeny na chemické vlastnosti dcérskeho rádionuklidu,
- chemické vlastnosti nižších oxidačných stupňov technécia v kyslých vodných roztokoch,
- separácia technécia a paládia z odpadových roztokov procesu PUREX,
- membránové metódy separácie rádionuklidov,
- vývoj rádiometrickej detekcie pre izotachoforézu,
- sorpčné a spoluzrážacie metódy separácie rádionuklidov,
- vývoj separačných metód rádionuklidov pre ich stanovenie,
- špeciácia rádionuklidov,
- príprava rádionuklidov pomocou urýchľovačov a výroba radiofarmák.

Od roku 2005 spolupracuje na vývoji rádiofarmák a ich zavádzani do praxe v spoločnosti BIONT a.s. Ide o prípravu krátko žijúcich PET rádionuklidov pomocou jadrových reakcií na cyklotróne a výrobu rádiofarmák v podmienkach správnej výrobnej praxe.

Bol hlavným riešiteľom projektov APVV, VEGA, NATO a v roku 1999-2001 kontraktorom projektu TEMPUS. Bol tiež vedúcim projektov riešených v rámci MAAE vo Viedni so zameraním na implementáciu INIS na Slovensku a na zavedenie princípov QA/QC na pracovisku. V rámci projektu výstavby cyklotronového centra na Slovensku sa stal členom expertnej skupiny pre rádiofarmaká. Na katedre je technickým manažérom pre kontrolu kvality Rádiochemického laboratória, ktoré je akreditované orgánom SNAS a podieľa sa na implementácií princípov kontroly kvality pre stanovenie rádionuklidov aj formou školení pracovníkov z jadrovej energetiky.

Je spoluorganizátorom medzinárodnej konferencií „Separation of Ionic Solutes“, členom expertnej skupiny pre MAAE vo Viedni a členom skupiny pre INIS na Slovensku. Je zodpovedný a aj sa podieľa na školení pracovníkov z rozvojových krajín prostredníctvom MAAE, alebo prostredníctvom kurzov, ktoré sa pripravili pre MAAE. Je členom Slovenskej chemickej spoločnosti, kde v rokoch 1 998 – 2 000 bol členom širšieho predsedníctva tejto spoločnosti. Je členom WP on Nuclear and Radiochemistry Europskej chemickej spoločnosti za Slovensko a členom správnej rady nadácie Curie.

Spolupracuje s kolegami z Aristoteles Univerzity v Tessalonikach, Grécko a s Groningen Univerzity.

Ad multos annos!

M. Galamboš

Vizitka

20.05.1947 sa narodil v Kežmarku, Slovensko.

Vzdelanie a profesionálna kvalifikácia

1953 – 1962 Základné školské vzdelanie v Podolínci okres Stará Ľubovňa
1962–1965 Stredná všeobecnovzdelávacia škola, Kežmarok
1965 – 1970 Štúdium na Prírodovedeckej fakulte UK ukončený štátnou skúškou.
1974 RNDr. Prírodovedecká fakulta UK
1981 CSc. Prírodovedecká fakulta UK, Odbor jadrová chémia
2002 DrSc. Technická univerzita Bratislava

Zamestnanie

1970 Študijný pobyt Prírodovedecká fakulta UK
1972 – 1974 Asistent na Katedre jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta UK
1974 – 1991 Odborný asistent na Katedre jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta UK
1991 Docent Prírodovedecká fakulta UK
1990 – 1997 Vedúci katedry jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta UK
1997 – 2002 Prodekan, Prírodovedecká fakulta UK
2004 – Profesor Prírodovedecká fakulta UK

Študijné pobyty

1991 6 mesačný študijný pobyt, Imperial College, Anglia v rámci projektu TEMPUS
1993 3 mesačný študijný pobyt, Imperial College, Anglia v rámci projektu TEMPUS

Členstvo v komisiách

1997 – 2002 Vedecká rada, Prírodovedecká fakulta UK
1998 – 2002 Vedecká rada, FMFI UK
1997 – 2000 člen predsedníctva SCHS
2001 – doteraz člen edičnej rady časopisu „ Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry“ Kluwer

Za docentom RNDr. Petrom Kutschym, CSc.

V uplynulých dňoch nás náhle opustil vo veku nedožitých 59 rokov po krátkej a ťažkej chorobe náš dlhoročný kolega a priateľ, zanietený chemik, vysokoškolský učiteľ, vedec a organizátor doc. RNDr. Peter Kutschy, CSc., mimoriadny profesor, vedúci Katedry organickej chémie Ústavu chemických vied na Prírodovedeckej fakulte UPJŠ v Košiciach. Odišiel vzácny človek, ozajstný odborník a nadšený výskumník, ktorý podstatnou mierou prispel k rozvoju modernej organickej a farmaceutickej chémie na Slovensku. Uplynulo už veľa času, hoci sa to zdá tak nedávno, keď sme sa prvý raz stretli ako mladí študenti v laboratóriu na Moyzesovej 11.

Doc. RNDr. Peter Kutschy, CSc. sa narodil 12.7.1953 v Košiciach. Vysokoškolské vzdelanie v chémii získal na Prírodovedeckej fakulte UPJŠ v Košiciach v rokoch 1971-1976. V období 1977-1980 bol interným ašpirantom Katedry organickej chémie CHTF SVŠT v Bratislave, ašpirantúru však vďaka pomoci sesterskej katedry realizoval na Katedre organickej chémie PF UPJŠ pod vedením Prof. Ing. Pavla Kristiana, DrSc. V roku 1977 obhájil rigoróznu prácu a získal titul RNDr. Po úspešnom získaní vedeckej hodnosti kandidáta vied v organickej chémii v roku 1981 pracoval na katedre najprv ako vedecký pracovník do roku 1990, neskôr po získaní vedeckého kvalifikačného stupňa II.A v roku 1988 ako samostatný vedecký pracovník až do roku 1998. V tej dobe rozsiahlo študoval syntézy a vlastnosti rozmanitých heterocyklických štruktúr na báze izotiokyanátov v spolupráci s viacerými kolegami, najmä Prof. RNDr. Milanom Dzurillom, CSc., a zaviedol v Košiciach techniky fotochemických reakcií. Po svojej habilitácii v odbore organická chémia na materskom pracovisku v roku 1998 začal tvorivo rozvíjať so svojimi študentmi a doktorandmi nový výskumný smer chémie fytoalexínov, analógov prírodných zlúčenín na báze indolu, podložený aj zavedením nových predmetov, najmä farmaceutickej chémie, kde garantoval aj študijné zameranie v tomto smere. V rokoch 1989-1990 pôsobil 10 mesiacov na stáži na Univerzite Salford v Anglicku a v roku 1996 na Univerzite L. Pasteura v Štrasburgu.

Za 35 rokov pôsobenia na škole vychoval generácie študentov, diplomantov a doktorandov, ktorí dnes pracujú v rôznych sférach života na Slovensku i v ďalekom zahraničí, a spomínajú na jeho pedagogický talent a majstrovstvo. Jeho vedecká škola vstúpila do povedomia nielen slovenskej a českej vedeckej komunity, ale aj na viacerých zahraničných pracoviskách, najmä v Japonsku a USA, s ktorými dlhodobo vedecky spolupracoval. Publikoval viac než ako 75 karentovaných vedeckých publikácií, na ktoré získal vyše 330 SCI citácií, a prednášal na mnohých konferenciách. Pôsobil aj ako organizátor akademického a vedeckého života a od roku 2002 doposiaľ bol vedúcim Katedry organickej chémie ÚCHV PF UPJŠ, ktorá sa dnes aj vďaka jeho úsiliu úspešne rozvíja. Bol tajomníkom odbornej skupiny pre organickú chémiu Slovenskej chemickej spoločnosti, recenzent množstva pôvodných vedeckých prác, oponent habilitačných a doktorandských dizertačných prác a posudzovateľ grantových projektov. Získal Cenu dekana PF UPJŠ za vedeckovýskumnú činnosť v roku 2000 a pozvania na viaceré prednášky v zahraničí.

S manželkou Kvetoslavou, tiež chemičkou, vychoval syna Maroša a má dvoch vnukov, ku ktorým mal veľmi vrelý vzťah. Bol našim dobrým priateľom a kolegom, človekom oddaným svojmu poslaniu, veselej povahy a športového ducha, s ktorým sme strávili my, jeho kolegovia, študenti a doktorandi množstvo nezabudnuteľných chvíľ v podnetných vedeckých polemikách, na jeho prednáškach na významných vedeckých konferenciách, v laboratóriu nad zaujímavými problémami, alebo spoločenských podujatiach v škole či v prírode. Takto si ho budeme pamätať a taký navždy zostane v našich srdciach.

Človek odchádza, ale dielo za ním zostáva a spomienka nezomiera. Česť jeho pamiatke!

J. Imrich

LABOR-TESTEXPO

ŠPECIALIZOVANÁ VÝSTAVA LABORATÓRNEJ TECHNIKY, SLUŽIEB
A POMÔCOK - TESTOVANIA, SKÚŠOBNÍCTVA

8. - 9. 11. 2012

INCHEBA, a.s., Viedenská cesta 3-7 • 851 01 Bratislava
T +421-2-6727 2194 • **F** +421-2-6727 2201 • **E** lkopecky@incheba.sk

www.incheba.sk

INCHEBA
EXPO BRATISLAVA

Celých **24** hodín denne

3 700 ľudí spracúva

ročne **6** miliónov ton ropy

v jednej z **3** najlepších rafinérií v Európe,*

aby ste vy mohli naštartovať vaše auto.

ČLEN SKUPINY MOL

*Analýza Wood Mackenzie z roku 2008, porovnávanie európskych rafinérií.

www.slovnaft.sk

Slovnaft