



BULLETIN

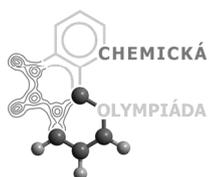
ASOCIACE ČESKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

Ročník 45

Číslo 1



Georgii Agricolae De Re Metalica Libri XII



Český komitét
ČKCH
pro chemii



ČESKÁ SPOLEČNOST CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ
CZECH SOCIETY OF CHEMICAL ENGINEERING



Obsah Chemické listy 2013, číslo 11 a 12

ČÍSLO 11/2013

ÚVODNÍK	833
REFERÁTY	
Dikyan-substituované akceptorní jednotky v push-pull chromoforech s vnitřním přenosem náboje	834
F. Bureš	
Alternativní metody separace kapalných biopaliv z média při fermentaci	843
P. Fribert, L. Paulová, P. Patáková, M. Rychtera a K. Melzoch	
Využitie superkritickej vody pre spracovanie organických materiálov	848
M. Gajdoš a M. Varchola	
Leucitová dentální keramika	856
A. Kloužková, M. Mrázová, M. Kohoutková a J. Kloužek	
Tradiční plniva tablet ve funkci nanonosičů léčivých látek	862
P. Ondrejček, P. Svačinová, M. Řehula a M. Rabišková	
Náhradní sladidla	867
J. Čopíková, J. Moravcová, Z. Wimmer, L. Opletal, O. Lapčík a P. Drašar	
LABORATORNÍ PŘÍSTROJE A POSTUPY	
Rychlá detekce thiabendazolu v laterálním toku na membráně s nanočásticemi zlata	875
S. Göselová, B. Holubová, M. Blažková a L. Fukal	
Využití jednokapilárového obousměrného sekvenování pro genotypizaci <i>TGFβ1</i> genu	880
M. Beránek, M. Drastíková, I. Sirák, S. Paulíková, M. Vošmik a J. Petera	
Aplikace niklu a nanoniklu do terestrického prostředí	885
H. Palková, T. Sovová, I. Koničková, V. Kočí, V. Bartůněk a Z. Sofer	
Inhibiční působení sloučenin dusíku při nitrifikaci odpadních vod	892
J. Radechovský, P. Švehla, H. Hrnčířová, L. Pacek a J. Balík	
VÝUKA CHEMIE	
Úroveň vybraných chemických dovedností žáků základních škol a gymnázií	897
H. Čtrnáctová, H. Cídllová, E. Trnová, A. Bayerová a G. Kuběnová	
ZPRÁVY	906

ČÍSLO 12/2013

ÚVODNÍK	913
REFERÁTY	
Studium enzymových reakcí kapilární elektroforézou v on-line uspořádání	914
R. Řemínek, M. Zeisbergerová a Z. Glatz	
Biotechnologický význam lakasy a její charakteristika	921
M. Jořenek a L. Zajoncová	
Rezistentní a pomalu stravitelný škrob	929
E. Šárka, P. Smrčková a L. Seilerová	
Kardiolipín, esenciální fosfolipid biogenézy a funkcie mitochondrií	936
V. Palovičová a M. Obernauerová	
Transportné proteíny a enzýmy v epiteli bachora ruminentov	942
M. Daňo, M. Galamboš a O. Rosskopfová	
Ionizační techniky a rozhraní pro spojení kapilárních elektro-migračních metod s hmotnostně spektrometrickou detekcí	949
R. Norková, J. J. Dyrťová a V. Kašíčka	
LABORATORNÍ PŘÍSTROJE A POSTUPY	
Šetrná metoda extrakce polyaramidového vlákna z epoxidového kompozitu	956
J. Podzimek a Z. Mašek	
Výskyt esterů kyseliny ftalové v potazích na volant vozidel	960
Š. Čorňák, A. Jarošová a L. Puškárová	
Frakcionácia kadmia a olova z reálneho sedimentačného prostredia sedemkrokovou selektívnou sekvenčnou extrakciou	963
J. Urminská, D. Urminská a P. Ondříšek	
Štúdium molten globulárneho stavu cytochrómu c pomocou viskozimetrie	969
M. Stupák a M. Antalík	
Štúdium vplyvu chemického zloženia elektrolytu na mikrotvrdosť vrstvy vytvorenej anodickou oxidáciou hliníka	973
M. Badida, M. Gombár, J. Kmec, L. Sobotová, A. Vagaská a P. Michal	
RECENZE	978
POLYSACHARIDY 2013 – Dodatky	980

POROVNÁNÍ NEJDŮLEŽITĚJŠÍCH CHEMICKÝCH BÁZÍ DAT – PROGRAMU SCIFINDER A DATABÁZOVÉHO SYSTÉMU REAXYS

JAROSLAV ŠILHÁNEK

*Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
silhanek@vscht.cz*

Došlo 12.7.13, přijato 11.10.13.

Klíčová slova: chemické báze dat, SciFinder, Reaxys, Beilstein, Gmelin, Patent Chemistry Database, reakční báze dat

Obsah

1. Úvod
2. Inherentní vlastnosti chemickýchází dat
 - 2.1. Systémází Chemical Abstracts – program SciFinder
 - 2.2. Systém Reaxys – báze dat Beilstein, Gmelin a Patent Chemistry Database
3. Experimentální studie rozdílů mezi nejdůležitějšími chemickýmiázemi dat
 - 3.1. Rešerše využívající textové předmětové formulace
 - 3.2. Porovnání rešerší zaměřených na nalezení chemických sloučenin
 - 3.3. Vyhledávání chemických reakcí
4. Vyhledávání fyzikálně-chemických dat
5. Patentové rešerše
6. Závěr

1. Úvod

Existence počítačových chemickýchází dat je už považována za naprostou samozřejmost s jistým povědomím, že je to drahé, a že občas hrozí ukončení přístupu pro nedostatek finančních prostředků. Stejně tak zůstává v povědomí chemiků, že nejdůležitější chemická báze dat zůstává Chemical Abstracts (CA), i když se skrývá pod ochrannou značkou pro počítačovou aplikaci SciFinder, s jejíž pomocí s informacemi z Chemical Abstracts pracujeme. A obdobně organičtí a anorganičtí chemikové vědí, že klasické „Handbuchy“ Beilstein a Gmelin existují jako báze dat, dnes provozované vydavatelstvím Elsevier pod jinou komerční značkou Reaxys doplněné ještěází dat Patent Chemistry Database. S ohledem na vysoké náklady pro zpřístupnění právě těchto klíčových chemickýchází dat, z celorepublikového hlediska v řádech desítek milionů, vyvstává otázka, do jaké míry se tyto systémy překrý-

vají či doplňují a zda má smysl investovat do jednoho či druhého nebo do obou těchto databázových systémů. Tato práce se především snaží zdůraznit rozdílné inherentní výchozí charakteristiky obou systémů a na reálných příkladech je potvrdit a ilustrovat a alespoň orientačně na omezeném souboru konkrétních příkladů dokumentovat rozdíly v efektivitě, rozsahu i relevanci výsledných rešerší.

2. Inherentní charakteristiky chemickýchází dat

2.1. Systémází Chemical Abstracts – program SciFinder¹

Název SciFinder je počítačová aplikace, která umožňuje pracovat s veškerým digitalizovaným materiálem, který producent, Chemical Abstracts Service (CAS), součást Americké chemické společnosti, od r. 1907 nashromáždil a dále shromažďuje. Budiž velmi zdůrazněno, že koncepce zpracovávání primárních informačních zdrojů je i v případě elektronické verze stále stejná a je založena na „ručním“, tedy intelektuálním zpracování článku nebo patentu vysoce kvalifikovaným specialistou do podoby záznamu obsahujícím vedle bibliografické identifikace stručný, ale odborně fundovaný věcný popis obsahu daného dokumentu formou předmětových hesel a výčet všech chemických sloučenin v dané práci studovaných. Takže i elektronická báze dat je především bibliografickouází dat, jejíž funkcí je odkazovat na primární zdroje, které by měly obsahovat hledané informace. Vzhledem k zásadě přijaté na samém počátku této činnosti v r. 1907, že totiž z každé zpracované publikace jsou do vzorcových rejstříků zaevidovány všechny v dané publikaci studované nebo vůbec použité chemické sloučeniny, představují tyto rejstříky dnes v elektronické formě pod označením REGISTRY nejautoritativnější seznam všech známých, tedy popsanych chemických sloučenin. Poměrně nedávno byl tento systémází doplněn oází CASREACT, což je samostatně vytvářená báze chemických reakcí a informace o existenci chemických sloučenin je doplňována o jejich vlastnostech převzatých z původních zdrojů a dále je vytvářena báze dat komerčně dostupných sloučenin a báze právních předpisů regulujících jakékoliv manipulace s chemickými látkami. Proto hovoříme o systémuází CA zpřístupňovaných programem SciFinder.

2.2. Systém Reaxys² – báze dat Beilstein, Gmelin a Patent Chemistry Database³

Báze dat Beilstein¹ a Gmelin¹, které představují základ dnešního systému Reaxys, jsou naproti tomu přede-

vším digitalizovanou verzí původních tištěných „Handbuchů“, ovšem doplněnou o období v tištěných svazcích nezpracované. Jak v tištěné podobě, tak i jako elektronické báze dat jsou díla Beilstein a Gmelin vytvářena jako soupis všech známých sloučenin dané kategorie, způsobů jejich vzniku nebo přeměn a všech jejich vlastností do konkrétní doby a nikoliv jako průběžně doplňovaný zdroj bibliografických informací. Na obr. 1 je uveden typický záznam sloučeniny v kompendiu Beilstein, v bázi dat je takový záznam doplněn především o grafickou reprezentaci v něm obsažených informací.

Je evidentní, že kromě zmínek o reakční teplotě nebo fyzikálně-chemických veličinách, nejsou uvedeny žádné další údaje a nemůžeme je proto ani vyhledávat. Ale obdobně jako producent bází dat CA, tak i vydavatelství Elsevier se snaží tuto původní koncepci seznamu chemických sloučenin a jejich vlastností rozšířit do oblasti bibliografických bází dat. Děje se to jednak doplňováním názvů a abstraktů článků, tak i propojováním báze Reaxys s dalšími bázemi, které nakladatelství Elsevier provozuje – především bází Scopus.

Významný je dále i rozdíl v počtu zpracovávaných primárních publikací. CA se od samého počátku snažila zachytit a zpracovat chemické i chemicko-inženýrské informace v nejširším možném rozsahu oborovém i regionálním včetně patentů. Naproti tomu materiál do děl Beilstein i Gmelin byl vybírán především z časopisů zaměřených na chemii organickou, resp. anorganickou, tedy na principiálně omezený okruh titulů. A i když jej nakladatelství Elsevier postupně rozšiřuje, okruh titulů zpracovaných do formátu bází Beilstein a Gmelin je stále menší než v případě CA.

3. Experimentální studie rozdílů mezi nejdůležitějšími chemickými bázemi dat

V zásadě pracujeme s oběma nejdůležitějšími chemickými bázemi dat analogicky, jako s většinou ostatních elektronických bází dat kromě jedné specifické výjimky, kterou je možnost formulace strukturálních dotazů graficky. Takže buď hledáme relevantní informace zadáváním předmětových hesel, klíčových slov nebo jiných textově vyjádřených problémů – včetně slovní identifikace struktury chemických sloučenin triviálním nebo systematickým názvem, nebo použijeme strukturální editory pro zadání struktury sloučeniny. Tomu odpovídá i nabídka rešeršních strategií, která je v obou případech prakticky totožná a skrývá se pod označením *Explore Topics* v programu SciFinder nebo *Literature* v systému Reaxys, kde pracujeme především s předmětovými hesly, jmény autorů, apod. Hledáme-li konkrétní sloučeninu nebo skupinu sloučenin a jejich přeměn, vycházíme z *Explore Substances*, resp. *Explore Reactions* v programu SciFinder a *Reactions* v systému Reaxys, a to nejčastěji s využitím tzv. strukturálních editorů. Hledáme-li rozdíly v rešeršním potenciálu mezi oběma bázemi, je účelné je hledat při jednotlivých rešeršních strategiích.

3.1. Rešerše využívající předmětová hesla – *Search Topics* nebo *Literature*

Mějme za úkol vyhledat relevantní práce o vlivu rutheniových katalyzátorů na stereoselektivitu hydrogenačních reakcí, pro což se nabízejí následující předmětová hesla: *hydrogenation*, *stereoselective*, *ruthenium* a *catalyst*.

4-Brom-1-acetoxy-benzol, Essigsäure-[4-brom-phenylester], [4-Brom-phenyl]-acetat
 $C_8H_7BrO_2$, Formel XVIII (R = CO-CH₃) (H 200). B. Aus 4-Brom-phenol und Acetylchlorid (KLARMANN, Mitarb., *Am. Soc.* **55** [1933] 4657, 4661). Durch Erwärmen von Essigsäure-phenylester mit *N*-Brom-succinimid in Tetrachlormethan (BUU-HOI, *A.* **556** [1944] 1, 7). — K_p : 100° (KL., Mitarb.). — Beim Erhitzen mit AlCl₃ auf 150–160° entsteht 5-Brom-2-hydroxy-acetophenon (KL., Mitarb.).

Obr. 1. Ilustrace záznamu sloučeniny v tištěném svazku Beilsteinova kompendia, Beilstein Handbook, 6 III 747. Přetištěno se svolením Beilsteinova Institutu

Tabulka I

Výsledky rešerše problematiky stereoselektivní hydrogenace na rutheniových katalyzátorech v programu SciFinder

29 references were found containing " Stereoselective hydrogenation with ruthenium catalyst " as entered.	29 ¹⁰
1009 references were found containing the two concepts " Stereoselective hydrogenation " and " ruthenium catalyst " closely associated with one another.	1009
1653 references were found where the two concepts " Stereoselective hydrogenation " and " ruthenium catalyst " were present anywhere in the reference	1653

SciFinder nám doporučuje formulovat dotaz jako větu: *Stereoselective hydrogenation with ruthenium catalysts*, což poskytne výsledek sumarizovaný v tab. I.

Systém Reaxys na stejný dotaz v maximálním rozsahu, tedy:

stereoselective AND hydrogenation AND ruthenium AND catalysts*

poskytne jen 34 odkazů, což svádí k závěru o shodě s nejvíce relevantním souborem s počtem 29 odkazů z SF, ale diametrálně se lišící s množinou „*closely associated*“, která obsahuje 1019 odkazů a už vůbec nesrovnatelně s maximální odpovědí v počtu 1653 citací. Pokud zcela opustíme dotaz na chemickou entitu, tedy prvek ruthenium, a budeme hledat informace o analýze fenolů v odpadních vodách, dostaneme na dotaz *Analysis of phenols in waste water* 1512 odkazů charakterizovaných jako *closely associated* v programu SciFinder a 934 odkazů na obdobný dotaz (analysis AND phenol* AND waste AND water) v Reaxysu. A ještě daleko výraznější rozdíl je, že soubor citací z SciFinderu vede k více než 1000 sloučeninám a reakcím, zatímco soubor odkazů z Reaxysu jen k 59 sloučeninám ve třech reakcích. Čím jsou způsobeny tyto velké rozdíly ve výsledných souborech odkazů?

Především asi zkušenějšího chemika s konkrétnější představou o charakteru obouází dat příliš nepřekvapí rozdíly ve výsledcích rešerše analýzy odpadních fenolů, protože takovou rešerši by asi nikdy v Beilsteinově či Gmelinově kompendiu nedělal. Ovšem řada nalezených odkazů obsahuje jen název článku a abstrakt a nebyla tedy zpracována jako chemická publikace. Je to ilustrace výše zmíněné snahy rozšířit záběr do oblasti bibliografických zdrojů propojením báze Reaxys např. sází Scopus.

Odpověď na rozdíly ve výsledcích rešerše stereoselektivní hydrogenace poskytne analýza konkrétních dokumentů. Tak např. článek s názvem: *Asymmetric enamide hydrogenation in the synthesis of N-acetylcolchinel: A key intermediate for ZD6126*⁴, obsahuje ve svém názvu jen jeden ze zadaných termínů, „hydrogenation“, a ani jeho abstrakt (viz obr. 2) ostatní termíny neobsahuje, a přesto byl programem SF nalezen.

Tento článek nebyl nalezen v Reaxysu, přesto, že obsahuje naprosto stejný název i abstrakt. Ostatně v současné době jsou texty abstraktů univerzálně přebírány doází dat z původních publikací a není proto překvapující, že jsou v obouázích stejné.

Protože se jedná o nepochybně důležitou chemickou publikaci, její záznam vází Reaxys je, a to včetně slouče-

A synthesis of (S)-N-acetylcolchinel I (R = H), a key intermediate in the synthesis of the pharmaceutically useful phosphate prodrug ZD 6126 I (R = PO₃H₂), via catalytic asym. hydrogenation of enamide II was developed. After screening a range of metal and ligand combinations it was found that (S,S)-iPr-FerroTANE Ru(methallyl)₂ and [(S,S)-tBuFerroTANE Rh(COD)]BF₄ gave both high enantioselectivity (>90% ee) and high catalyst utility (molar S/C = 1000).

Obr. 2. Abstrakt článku⁴ v originální publikaci a obouázích dat

Concepts	
Alkaloids	
asym. synthesis of N-acetylcolchinel, a key intermediate for ZD 6126, via rhodium or ruthenium catalyzed stereoselective enamide hydrogenation	
Reactant; Synthetic preparation; Preparation; Reactant or reagent	
Stereoselective synthesis	
of N-acetylcolchinel, a key intermediate for ZD 6126, via rhodium or ruthenium catalyzed stereoselective enamide hydrogenation	
Hydrogenation	Hydrogenation catalysts
stereoselective; asym. synthesis of N-acetylcolchinel, a key intermediate for ZD 6126, via rhodium or ruthenium catalyzed stereoselective enamide hydrogenation	

894762-65-3 🔍

asym. synthesis of N-acetylcolchinel, a key intermediate for ZD 6126, via rhodium or ruthenium catalyzed stereoselective enamide hydrogenation

Reactant; Reactant or reagent

Obr. 3. Ilustrace rozsáhlého předmětového popisu obsahu článku v CA. Převzato z programu SciFinder laskavostí Americké chemické společnosti

nin a reakcí, ale nebyl nalezen ve výše zadané rešerši, protože ani jeho název, ani abstrakt neobsahují zadaná hesla. Naproti tomu báze SciFinder je bohatě doplněna předmětovými hesly vytvořenými vysoce kvalifikovanými abstraktory producenta, mezi kterými jsou všechny termíny, které byly použity ve formulaci dotazu (obr. 3).

Hlavní rozdíly ve výsledcích rešerši programem SciFinder a Reaxys spočívají především v rozsáhlém předmětovém popisu dokumentu systémem předmětových hesel a klíčových slov prováděném specialisty producenta, který v systému Reaxys a před tím v bázích Beilstein a Gmelin chybí. I když v bázi Scopus a dalších jsou uváděna klíčová slova nebo další předmětová hesla, jsou výsledkem počítačového zpracování textů abstraktů a maximálně „ručního“ zařazení do některé velké oborové skupiny. Ale přesto není rozumné paušálně předmětové rešerše uvedeného typu z Reaxysu odmítat, bližší prozkoumání výše uvedených výsledků rešerši ukáže, že rešerše z Reaxysu není jen podmožinou souboru ze SciFinderu, ale obsahuje i řadu relevantních odkazů, které program SciFinder nenašel, např. publikace^{5,6}, což platí i obráceně. Důvody spočívají opět především v rozdílném předmětovém popisu primárního dokumentu, jak je možné se přesvědčit ze záznamů v SciFinder nebo naopak v Reaxysu.

Zajímavé je i porovnání formulace předmětových dotazů v obou bázích dat. Systém Reaxys používá standardní Booleovské operátory včetně operátorů proximitních, jejichž použití je ponecháno na rozhodnutí uživatele, zatímco SciFinder nutí chemika formulovat jeho dotaz větou, tedy včetně předložek, spojek, členů apod., tedy bez operátorů. V žádném případě to ale neznamená, že mají sémantický význam, ale hrají roli při spuštění evidentně sofistikovaného algoritmu, který nikdy nebyl zveřejněn, jen zvnějšku byly ojedinelé snahy mu přijít na kloub⁷. Tato strategie, kterou SciFinder používá, představuje typickou „černou skříňku“, která ale překvapivě dobře funguje.

3.2. Rešerše chemických sloučenin – *Search Substances*, nebo *Substances and Properties*

Kromě nakreslení strukturálního vzorce umožňují oba systémy i standardní možnost zadání triviálním nebo systematickým názvem a molekulovým (sumárním) vzorcem. Problematičnost názvosloví je všeobecně známá, za zmínku stojí rozsáhlé soubory triviálních a komerčních názvů dříve v CA nepřipustných z důvodů úspory paměti. Sumární vzorce kromě toho, že mohou odpovídat i značně velkému počtu různých sloučenin, vyžadují pozornost v případě sloučenin sestávajících z více složek, typicky anorganických sloučenin. Reaxys akceptuje princip tištěných rejstříků Gmelina, které obsahovaly jak sumární vzorec s abecedně seřazeným výčtem všech prvků bez ohledu na to, zda jsou v kationtu, aniontu či jiné částici, tak i vzorce „rozepsané“. Tedy např.

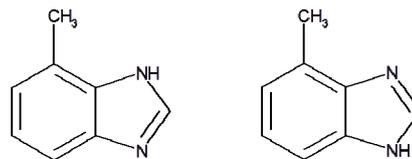
$C_6FeK_3N_6$ pro hexakyanidoželezitan draselný, ale také formu $[Fe(CN)_6]^{3-} \cdot 3K^{1+} = K_3[Fe(CN)_6]$, resp. jen $[Fe(CN)_6]^{3-} \cdot 3K^{1+}$. Tyto formy jsou pro využití poněkud těžkopádné. SciFinder naproti tomu striktně vyžaduje v

molekulových vzorcích samostatné zadávání jednotlivých strukturálních jednotek, tedy typicky iontů, které odděluje tečkou jako tzv. „dot-separated formula“. Tedy ve výše uvedeném příkladu bude sumární vzorec zadávaný pro SciFinder vypadat následovně: $C_6FeN_6.3K$. Forma $C_6FeK_3N_6$ v SciFinderu neposkytne žádnou sloučeninu.

Zadávání struktur organických sloučenin prostřednictvím strukturálních editorů je většinou bezproblémové, a to jak v programu SciFinder, tak i v systému Reaxys. Přesto, že Reaxys nabízí možnost nastavení z několika nejčastěji používaných a oblíbených strukturálních editorů, je doporučitelné pracovat s implicitně nastaveným editorem, pro který jsou adjustovány různé potenciální strukturální varianty, např. různé strukturální vyjádření nitroskupiny, s náboji či bez nich. Obě báze dat nabídnou po zadání struktury v režimu *Exact* zpravidla řadu příbuzných struktur lišících se přítomností izotopů, nábojů či radikálů apod., kterých bývá u Reaxysu méně a v SciFinderu je jejich nabídka přehlednější. Budeme-li např. hledat informace o 1*H*-benzimidazolu, dostaneme v případě *Exact Search* u SciFinderu pro neutrální uzavřenou strukturu s CAS RN = 51-17-2 9129 odkazů a v Reaxysu 2179 odkazů. Uvážíme-li, že citace v Reaxysu budou více „organické“ a v SciFinderu zahrnující širší aplikační oblasti, rozdíly nejsou dramatické a je možné je celkem snadno vysvětlit právě rozsahem zpracovávaných primárních zdrojů. Přesto i zde se můžeme setkat se zajímavými případy. Budeme-li např. hledat 7-methyl-1*H*-benzimidazol, dostaneme v SF informaci pouze o existenci jednoho tautomeru s CAS RN 4887-83-6, a to přesto, že program SciFinder, který tautomery ignoruje, by měl najít současně i druhý předpokládaný tautomer. Báze dat Reaxys naproti tomu umožňuje rozlišit tautomery v zadání nebo je ignorovat, a pokud zvolíme tuto možnost dostaneme jako odpověď obě předpokládané struktury (obr. 4). Sice pro obě uvádí Reaxys totožné CAS RN, tedy 4887-83-6, ale pro každou rozdílné způsoby přípravy a fyzikální data. Ovšem už záznam v CA obsahuje nejistotu ohledně názvu, jako správný je uveden název 7-methyl-1*H*-benzimidazol, ale mezi ostatními názvy jsou uvedeny i alternativně 4-methyl-1*H*-benzimidazol nebo varianta vyjadřující nejistotu – 7(4)-methyl-benzimidazol.

Na úrovni rešerše nejde o to, zda skutečně oba tautomery samostatně existují či nikoliv, ale tento případ ilustruje problematiku převodu dat z primárních zdrojů do databázového záznamu a užitečnost v detailech se lišících zásadách přebírání informací o strukturách.

Výraznější rozdíly nalezneme v případě anorganických sloučenin, což logicky vyplývá z faktu, že součástí Reaxysu je báze dat Gmelin, nejautoritativnější zdroj in-



Obr. 4. Tautomery 7(4)-methyl-1*H*-benzimidazolu

formací pro anorganické sloučeniny, i když neúplný. Tak např. při hledání komplexu stříbra s amoniakem akceptují jak Reaxys, tak i SF strukturní formulaci bez označení nábojů, které jsou implicitně doplněny a výsledkem je celá paleta nejrůznější strukturních modifikací, solí i komplexů. V SciFinderu je to 603 různých sloučenin obsahujících komplex $\text{Ag}(\text{NH}_3)$, v Reaxysu 97. Ovšem hlavní předností Reaxysu jsou bezprostřední odkazy na informace o reakcích a vlastnostech jednotlivých sloučenin. Tak např. pro samotný kation nenabídne SciFinder nic více, než jen odkazy na primární zdroje v počtu 217 citací. Reaxys naproti tomu odkazuje jen na 89 citací, ale na druhou stranu poskytne informace o cca 34 reakcích z toho 20 preparativních. A samozřejmě informace o fyzikálně-chemických datech, např. 18 polí pro faktografická data a 5 různých spekter kromě odkazů na publikace s kvantově-chemickými studii. Na druhé straně rešerše z Reaxysu neobsahuje žádný nitrid, který nalezneme až prostřednictvím názvu *silver nitride*.

Není překvapující, že v případě hledání konkrétních chemických sloučenin jsou výsledky v obou zdrojích s jistým nadhledem srovnatelné, ale v každém případě více či méně rozdílné, což je mimo veškerou pochybnost užitečný závěr. SciFinder představuje jistou normu vyplývající z role systému Registračních čísel. Dodejme ale, že CAS RN stále nejsou spolehlivým identifikátorem pro vyhledávání chemické sloučeniny v Reaxysu, protože zatím nedošlo k dohodě mezi CAS a vydavatelstvím Elsevier. V každém případě by měl mít chemik na paměti, že CA registruje chemickou sloučeninu jako jedince, jehož existence je zmíněna v primárním dokumentu a je tudíž spojena s jeho bibliografickým záznamem, zatímco Reaxys, potažmo tedy Beilstein či Gmelin, registrují záznam o sloučenině jako centrum své činnosti včetně informací o jejím vzniku, přeměnách a vlastnostech. O tyto údaje je dnes záznam sloučeniny obohacován v bázi REGISTRY a programem SciFinder propojován s bázi CASREACT.

3.3. Rešerše chemických reakcí – *Explore Reaction, Reactions*

Tato možnost se otevřela teprve v elektronických verzích, v tištěných verzích bylo možné vyhledávat informace o reakcích jen jako součást informací o individuálních sloučeninách nebo pomocí jmenných názvů reakcí nebo jiného slovního popisu. Zásadní rozdíl mezi oběma bázelemi lze vyjádřit následující charakteristikou:

Chemické reakce jako takové byly v systému bázi dat CA zaznamenávány do samostatné báze CASREACT teprve od cca osmdesátých let minulého století, a to ještě z omezeného okruhu disciplín (organická chemie a obory příbuzné).

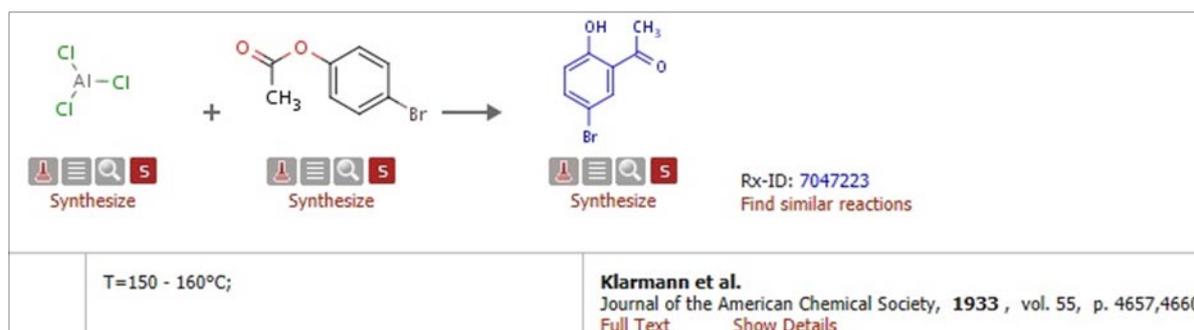
V systému Reaxys jsou přeměny chemických struktur neoddělitelnou součástí bázi Beilstein a Gmelin, jinak řečeno, v těchto bázích nemůže být uvedena sloučenina bez jejich reakcí a naopak.

Z toho vyplývá, že programem SciFinder nalezneme využitím *Explore Reactions* jen reakce z posledních cca 30 let a postupně i starších, ale převážně z oblasti organické a příbuzné chemie. Systém Reaxys, jak vyplývá z této charakteristiky, je reakční bázi dat v pravém slova smyslu, zatímco SciFinder pracuje se samostatnou reakční bázi CASREACT. Odpověď z báze Reaxys bude proto komplexnější, protože zahrnuje reakční informace z daleko širšího časového období, ovšem na druhé straně z daleko menšího počtu primárních zdrojů.

Celkové porovnání obou informačních zdrojů jako reakčních bázi dat je proto prakticky nemožné, lze jen porovnávat konkrétní záznamy z překrývajících se primárních zdrojů. Především připomeňme, že reakční informace v tištěných svazcích obou „Handbuchů“ jsou ve formě co nejstručnější věty, jak je ilustrováno v obr. 1. Tak např. věta „*Beim Erhitzen mit AlCl_3 auf $150\text{--}160^\circ$ entsteht 5-Brom-2-hydroxyacetophenon (Kl., Mitarb., citace)*“, byla převedena do elektronické báze jako rovnice v záznamu na obr. 5, což je nepochybně slušný programátorský výkon. Kromě názornosti získáváme i propojení na plný text, případně možnost vyhledávat příbuzné reakce.

Na tomto příkladu je možné ilustrovat zásadní problém reakčních bázi dat. Uvedená práce ve skutečnosti popisuje přípravu serie 2-alkyl-4-bromfenolů ze 4-bromfenolu acylací, přesmykem na 2-acyl-4-bromfenol a jeho konečnou redukci. Je to tedy vícestupňová syntéza, což sice z uvedeného záznamu není patrné, ale postupným využíváním nabídek *Synthesis* nebo otevřením plného textu se to dozvíme. Protože ale další zmíněné kroky jsou rovněž součástí dané reakční báze, nabízí se možnost naprogramovat zobrazení celé vícestupňové syntézy jako schématu. Tato cesta je v bázi Reaxys postupně realizována jako nabídka *View Scheme* v případě zatím některých reakcí. SciFinder a báze CASREACT má zobrazování vícestupňových reakcí zabudováno standardně v případě, že v experimentální části publikace jsou uvedeny jen jednotlivé syntetické kroky, které jsou postupně kumulovány do vícestupňových schémat. Takže např. bude-li v publikaci experimentální popis čtyř reakcí vedoucí ke konečnému produktu označenému např. číslem 5, tedy formálně: $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 3$, $2 \rightarrow 4$ za alternativních podmínek, $4 \rightarrow 5$, neboli z výchozí sloučeniny 1 jsou postupně připraveny sloučeniny 2,3,4 a konečná sloučenina 5. Tyto reakce jsou samozřejmě převedeny do báze CASREACT individuálně jako jednostupňové, ale navíc jsou vytvořeny i jejich vícestupňové kombinace. Nejdříve tedy tři 2-stupňové reakce: $2 \rightarrow 4 \rightarrow 5$; $1 \rightarrow 2 \rightarrow 4$; $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$; a konečně jedna 3-stupňová reakce: $1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 5$, protože produkt 3 není využit k žádnému dalšímu kroku.

Systém Reaxys zatím takto důsledný není, ale postupně je tímto směrem rozšiřován. Tak např. práce Wernera a spol.⁸ je zpracována v bázi CASREACT do 119 reakcí, zatímco v Reaxysu jen do 41 reakcí, rozdíl jde na vrub rozsahu kombinací doplněných individuálních kroků vícestupňových reakcí. V každém případě možnost zobrazit vícestupňovou syntézu jako celkové reakční schéma ukáže na první pohled, jaké jsou výchozí sloučeniny a následně



Obr. 5. Ilustrace převedení popisu reakce z tištěného díla Beilstein

meziprodukty. Kromě toho jak SF, tak i Reaxys ve svých současných verzích nabízí nástroje pro retrosyntetické studie (*Synthesis Planner*), Reaxys je začíná používat právě pro znázornění vícestupňových reakcí.

Nejvýraznější rozdíly při hledání chemických reakcí, a to ve prospěch Reaxysu, najdeme podle očekávání u anorganických sloučenin. Hlavním důvodem je skutečnost, že CAS nezpracovává informace o přípravách a reakcích anorganických sloučenin do báze CASREACT. Není pak překvapující, že při pokusu vyhledat programem SciFinder, jak připravit kyselinu tetrathionovou nenalezneme pod nabídkou „*Get Reaction*“ buď vůbec žádný odkaz, nebo jen výjimečné případy zpravidla nesouvisející s problémem, který hledáme. Tak např., budeme-li hledat informace o volné či ionizované kyselině tetrathionové nebo jejích solích, v zásadě nenarazíme na problémy názvoslovné (*tetrathionic acid*) nebo problémy s grafickou reprezentací a jak při práci s programem SciFinder, tak i systémem Reaxys se celkem srozumitelně vyrovnáme se strukturálními alternativami, jako je volná kyselina, dianion, diradikál apod. SciFinder nabídne takových variant o dvě nebo tři více. Ovšem u všech těchto alternativních struktur dostaneme sice více odkazů na původní publikace, ale pro jednotlivé varianty nedostaneme v programu SciFinder žádnou preparativní reakci. Informace z Reaxysu jsou naproti tomu bohaté, viz následující tab. II.

Analogické výsledky dostaneme i v případě anorganických sloučenin tradičně strukturálně formulovaných kovalentně, např. v případě pentabromfosforu. SciFinder nám poskytne sice 5169 reakcí, ale žádná z nich neobsahuje tuto sloučeninu jako produkt. Naproti tomu z Reaxysu dostaneme jen 432 odkazů na reakce této sloučeniny, ale

36 z nich se týkají její přípravy v pravém slova smyslu. Což ovšem neznamená, že se z bázi dat CA nedozvíme, jak se pentabromfosfor dá připravit. Tento úkol ale zůstává na úrovni předmětového popisu, tedy práce v režimu *Explore Topics*, např. požadavkem *Preparation of Phosphorus pentabromide*, nebo *Explore Substance*, a dále omezení souboru odkazů jen na takové, které spadají do kategorie *Preparation*. Jedná se *de facto* o standardní postup v tištěných verzích, kde bylo nutné v seznamu upřesňujících hesel u požadované sloučeniny zachytit termín prep. nebo manuf. případně další, které jsou do elektronické báze převedeny z tištěné verze a nadále standardně vytvářeny.

Phosphorus bromide, PBr₅, 7789-69-7P
manuf, from Br and PBr₃
Preparation

4. Vyhledávání fyzikálně-chemických dat

Tato možnost se v užším a realistickém slova smyslu nabízí jen v systému Reaxys, kde ve výchozí volbě je přímo uvedeno *Substances and Properties*. Podobná nabídka, *Property*, se dnes objeví také v programu SciFinder jako další možnost při volbě *Explore Substances*, ale je evidentní, že se jedná jen o první pokus nabídnout vyhledávání numerických dat, a to jak vypočtených, tak i experimentálních, která jsou v poslední době excerpována z primárních zdrojů kromě bibliografického záznamu a chemických sloučenin. V této oblasti je ale stále Reaxys vůči programu

Tabulka II

Výsledky hledání způsobů přípravy kyseliny tetrathionové v bázích SciFinder a Reaxys

	CAS RN	SciFinder	Reaxys
Volná kyselina	13760-29-7	Žádná reakce	64 prep ze 71 reakcí
Její dianion	15536-54-6	1 prep z 8 reakcí	224 prep z 334 reakcí
Draselná sůl	13932-13-3	Žádná prep z 20 reakcí	21 prep ze 75 reakcí

SciFinder bezkonkurenční, díla Beilstein a Gmelin jsou na sběru numerických dat pro každou uvedenou sloučeninu přímo založena. Roztřídění a hierarchický systém faktografických informací v Reaxysu je velmi podobný, ne-li přímo stejný, jako v předchozím nástroji CrossFire a je nepochybně impresivní a užitečný. A to jak pro skutečná numerická data nebo propojení na zdroje např. spekter (v současné době už podobná možnost existuje i z programu SciFinder), tak pro principiální informaci o rozsahu vůbec existujících naměřených dat pro individuální sloučeniny (alternativa dotazu *Exist*). Samozřejmě, problematika fyzikálně-chemických dat je mnohem rozsáhlejší a každý kvalifikovaný chemik se v ní musí orientovat individuálně.

SciFinder sice nenabízí tak názorně strukturovaný systém fyzikálně-chemických dat, ale výsledek takového dotazu je oproti Reaxysu ve výhodě díky zpracovávání daleko širšího spektra primárních zdrojů. Takže např. při hledání odkazů na studie teplotní závislosti hustoty 1-butanolu vede dotaz *Density temperature dependence of 1-butanol* v programu SciFinder k souboru cca 55 odkazů, mezi nimiž je např. odkaz na práci Komarenka a spol.⁹, který se v Reaxysu nevyskytuje evidentně proto, že tento časopis nebyl (a asi stále není) do Reaxysu excerpován. SciFinder jej najde na základě detailnějšího věcného popisu pro danou sloučeninu v následující podobě.

- 71-36-3, properties
 - $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$
- density and viscosity of, temp. dependence of Properties

Obecně je možné předpokládat, že problematika vyhledávání fyzikálně-chemických dat je mezi profesionálními chemiky natolik známá, že má smysl na tomto místě jen připomenout snad zažitě zkušenosti a důvody pro volbu toho či onoho zdroje.

5. Patentové rešerše

Součástí systému Reaxys je báze dat Patent Chemistry Database, relativně nový pokus o vyplnění mezery v nabídce informačních zdrojů³, protože vzhledem k mimořádně vysokým nákladům na sekundární zpracování chemických patentů přestaly být patenty zpracovávány jak do tištěného Beilsteina, tak i do jeho elektronické verze. CA tak zůstal jediným producentem patentových informací jako zdroj pro průmysl i akademickou sféru, mimo čistě komerční a příslušně drahé patentové báze společnosti DERWENT. CAS ve zpracovávání i přes vysoké náklady pokračuje a zpracovává chemické patenty ze 63 zemí, resp. jejich patentových úřadů. Naproti tomu báze Patent Chemistry Database se omezuje jen na evropské a tzv. světové patentové spisy, tedy spisy EU a WO a patentové spisy americké s časovým omezením od r. 1976.

Další omezení je na patentové třídy C07 *Organic Chemistry*, A01N *Agrochemicals/Biocides*, A61K *and secondary IPC C07 [Medicinal, Dental, Cosmetic Preparations]* a C09B *Dyes*. Oba systémy, program SciFinder i systém Reaxys proto obsahují nástroje pro omezení vybraných souborů jen na patentové spisy a v případě patentů prakticky vždy funguje propojení na plné texty do báze Espacenet nebo báze Amerického patentového úřadu.

Z výše uvedeného je tedy evidentní, že výsledky patentových rešeršů z programu SciFinder by měly být úplnější než z báze Reaxys. CAS je si vědoma své vysoké přidané hodnoty v této oblasti, a proto věnuje patentům velkou pozornost. Ale i v záznamech patentů v Reaxysu je patrná snaha o detailnější zpracování a není výjimkou, že záznam patentu je v Reaxysu zpracován z hlediska popsaných reakcí úplněji než v SciFinderu. Na druhé straně předmětový popis patentů v SciFinderu bývá podrobnější. Mimořádně cenné jsou zde informace o patentech z asijských zemí, z japonštiny, čínštiny a korejštiny. Přes své regionální a oborové omezení jsou patentové informace získané z Reaxysu cenné a často s překvapením zjistíme, že jeden i druhý systém nezachytily i velmi důležité a problému přesně vyhovující patenty. Další komparativní výhodou Reaxysu je možnost vyhledávat patenty na základě patentového třídění, které SciFinder zatím neumožňuje, ale pravděpodobně brzy nabídne.

6. Závěr

I přes omezený rozsah testovaných rešeršních případů je možné spolehlivě konstatovat, že koncepční zásady, na kterých byly a jsou vytvářeny sekundární informace v bázích CA a Reaxys/Beilstein, Gmelin, jsou stále nejdůležitějším faktorem rešeršních strategií a výrazně ovlivňují výsledky rešeršů a to zatím i přes programové doplňování výchozích koncepcí dříve neuváženými aspekty. Současné ale grafická, v zásadě ovšem počítačová reprezentace struktur a prostředí počítačovýchází otvírají dosud nevyčerpané možnosti práce s chemickými informacemi, které se postupně naplňují, a to v konkurenčním prostředí producentů. V každém případě ale platí, že jak rozdílné výchozí koncepce, tak i současná praxe zpracovávání primárních dokumentů u obou nejdůležitějšíchází dat vedou k výsledkům, které se s vysokou pravděpodobností nikdy nebudou naprosto překrývat, ale naopak umožní zachytit informace, které by při omezení na jednu nebo druhou bázi dat nebyly nalezeny a využity pro další výzkum.

Tato práce byla realizována jako součást projektu Chemické elektronické informační zdroje pro VaV, č.projektu: CZ.1.05/3.2.00/12.0231, řešeného v rámci programu OP VaVpI prioritní ose 3, podpořeného z prostředků Evropského fondu pro regionální rozvoj a MŠMT ČR.

LITERATURA

1. Šilhánek J.: *Chemická informatika*. Vydavatelství VŠCHT, Praha 2002.
2. <http://en.wikipedia.org/wiki/Reaxys>, staženo 10.7.2013.
3. http://www.akosgmbh.de/pdf/PCD_Brochure.pdf, staženo 10.7.2013.
4. Lennon I. C., Ramsden J. A., Brear C. J., Broady S. D., Muir J. C.: *Tetrahedron Lett.* 48, 4623 (2007).
5. Trindade A., Gois P.M. P., Afonso C. A. M.: *Chem. Rev.* 109, 418 (2009).
6. Church T., Andersson P.: *Coord. Chem. Rev.* 252, 513 (2008).
7. Wagner B. A.: *J. Chem. Inf. Model.* 46, 767 (2006).
8. Werner J., Cerbone L. R., Frank S. A., Ward J. A., Labib P., Tharp-Taylor R. W., Ryan C. W.: *J. Org. Chem.* 61, 587 (1996).
9. Komarenko V. G., Manzhelii V. G., Radtsig O. V.: *Ukr. Fiz. Zh. (Ukr. Ed.)* 12, 676 (1967).
10. Konkrétní počty nalezených odkazů se vztahují ke konkrétnímu datu provedení rešerše, což ale v časovém horizontu let v žádném případě neovlivní formulované závěry.

J. Šilhánek (*Department of Organic Technology, Institute of Chemical Technology, Prague*): **Comparisons of the Most Important Chemistry Databases – SciFinder Program and Reaxys Database System**

The possibility of comparing textual description of a problem is a clear advantage of the SciFinder resulting from abundant indexing of the paper content done by specialists in contrast to the description based on the paper title and abstract only. Search for individual compounds affords comparable results for both databases because both use the same principles of excerpting all compounds studied in a given document. In reaction search the advantage of Reaxys is distinct, much like the former databases Beilstein and Gmelin, which are built as reaction databases. The reaction module CASREACT in SciFinder is comparable with the Reaxys in the last 30–40 years only but offers no data for inorganic reactions. The patent search in Chemical Abstracts (CA) with traditional in-depth coverage of patents and in the Reaxys are strong in looking for data of both organic and inorganic compounds. Despite the attempts of both databases at extending coverage and being competitive, the concept based on bibliographic records in CA and compound listing in Beilstein or Gmelin lead to different results, which is advantageous for completeness and relevance of the results.

Ze života společnosti

Zpráva o volbách do Hlavního výboru a předsednictva České společnosti chemické

Dnem 30. září 2013 byly ukončeny volby do Hlavního výboru ČSCH na období 2013 až 2017. Byli zvoleni Jiří Barek, Markéta Bláhová, Filip Bureš, Pavel Drašar, Martin Fusek, Jan John, Viktor Kanický, Petr Klusoň, Zdeňka Kolská, Oldřich Lapčík, Jitka Moravcová, Václav Slovák, Petra Šulcová, Jan Tříška, Irena Valterová a Karel Ventura. Náhradníky Hana Čtrnáctová, Jana Čopíková a Tomáš Wágner. Do revizní komise byly zvoleny Žaneta Dohnalová, Karolina Pecková a Kateřina Valentová. Korespondenčním a nebo elektronickým způsobem volilo necelých 10 % členů Společnosti. Na ustavující schůzi Hlavního výboru 15.11.2013 byl zvolen veřejnou volbou předsedou ČSCH Jan John a členy předsednictva pak Filip Bureš, Pavel Drašar, Oldřich Lapčík, Václav Slovák a Petra Šulcová. Členy předsednictva se dále stali *ex officio* dle čl. 14 stanov ČSCH minulá předsedkyně Společnosti Jitka Ulrichová a šéfredaktor Chemických listů Pavel Chuchvalec. Ze zasedání se omluvil Petr Klusoň, který zároveň rezignoval na své členství v Hlavním výboru. Členem HV se v souladu se stanovami stala Hana Čtrnáctová. Složení Hlavního výboru a předsednictva včetně kontaktů naleznete na www.csch.cz.

Za volební komisi
Vilém Šimánek

Cena Rudolfa Lukeše za rok 2013 udělena prof. RNDr. Martinu Kotorovi, CSc. (PřF UK)

Letos proběhl druhý ročník Ceny Rudolfa Lukeše udělované Odbornou skupinou organické, bioorganické a farmaceutické chemie ČSCH za excelentní výsledky



Prof. RNDr. Martin Katora, CSc., doc. Ing. Michal Hocek, CSc., DSc. a zástupce firmy Lach-Ner

vysokého mezinárodního významu v oboru organické, bioorganické a medicínální chemie. Tato cena je sponzorovaná firmou Lach-Ner a sestává z certifikátu, osobní prémie (50 tis. Kč) a grantu na nákup chemikálií a rozpouštědel od Lach-Ner (100 tis. Kč). Vítězem za rok 2013 byl mezinárodní porotou vybrán prof. RNDr. Martin Katora, CSc. z Katedry organické chemie PřF UK. Cena byla laureátovi předána na konferenci 48. Pokroky v organické, bioorganické a farmaceutické chemii ("Liblice") konané ve Špindlerově Mlýně 1.–3. 11. 2013. Poté následovala přednáška laureáta shrnující jeho vynikající výsledky zejména v oblasti organokatalýzy a totálních syntéz přírodních látek.

Michal Hocek, předseda OS

Baderova cena za rok 2013

Baderova cena za organickou chemii byla udělena Petru Beierovi (*1978) za významný vědecký přínos do oblasti fluorovaných sloučenin s důrazem na vývoj nových metodologií a syntetických postupů. Syntéza nových typů fluorovaných sloučenin a studium jejich biologické aktivity jakož i vývoj nových metodologií pro selektivní zavedení atomu fluoru nebo fluorovaných funkčních skupin je oblast, ve které celosvětově probíhá velmi aktivní výzkum. Důvodem je fakt, že přítomnost atomů fluoru v molekule často dramaticky zlepšuje vlastnosti látek zvláště vůči metabolické degradaci u farmaceutických nebo agrochemických aplikací. Petr Beier absolvoval magisterské studium na katedře organické chemie Univerzity Pardubice a doktorské studium na University of St. Andrews ve Velké Británii. Roky 2005–2006 strávil na postdoktorském pobytu v USA na Loker Hydrocarbon Research Institute, University of Southern California. V roce 2007 úspěšně prošel konkurzem na místo vedoucího juniorského týmu na ÚOCHB AV ČR, v.v.i. a po evaluaci v roce 2013 se stal



Ing. Petr Beier, Ph.D. spolu s prof. J. Moravcovou při převzetí Ceny A. Badera pro rok 2013



Mgr. Martin Hrubý, Ph.D. při převzetí Ceny A. Badera pro rok 2013.

vedoucím seniorského týmu tamtéž. V době podání přihlášky byl autorem či spoluautorem 29 prací v respektovaných mezinárodních časopisech.

Baderova cena za bioorganickou a bioorganickou chemii byla udělena Martinu Hrubému (*1978) za významný vědecký přínos do oblasti aplikace polymerů jako selektivních sorbentů, nosičů micelárních systémů pro protinádorová léčiva a nosičů radionuklidů pro nukleární medicínu. V současné době se věnuje zejména posledním dvěma tématům, jejichž společným jmenovatelem je vytváření samospořádaných systémů citlivých na vnější podněty, a tak využitelných pro cílenou terapii. Martin Hrubý absolvoval magisterské studium na katedře organické a jaderné chemie UK v Praze a doktorské studium na VŠCHT Praha. V průběhu studia pracoval na ÚOCHB AV ČR, v.v.i. (1995–1997 a 2000). V roce 1999 byl na stáži v USA na University of California at Berkeley. V roce 2007 byl na postdoktorském pobytu v Polsku na Institute of Nuclear Chemistry and Technology ve Varšavě. Od roku 1998 je zaměstnán na Ústavu makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i. a od roku 2011 je na pozici samostatného vědeckého pracovníka. V době podání přihlášky byl autorem či spoluautorem 51 prací v respektovaných mezinárodních časopisech a výsledky obsažené ve 31 z nich byly přihlášeny do soutěže.

Jitka Moravcová

Přihlášky do soutěží o Ceny Alfreda Badera v r. 2014

V roce 2014 bude Česká společnost chemická tradičně pořádat soutěže o dvě prestižní Ceny Alfreda Badera, a to o *Cenu za organickou chemii* a *Cenu za bioorganickou a bioorganickou chemii*. Oblasti působnosti obou Cen se poněkud překrývají a to nabízí možnost, že soubor prací, který neuspěl v jedné soutěži, lze přihlásit do soutěže o druhou Cenu po případných úpravách doprovodného textu. Nadále však platí omezení, že je možno získat jen

jednu z Cen Alfreda Badera pro české chemiky, přitom obě Ceny jsou rovnocenné.

Uzávěrka přihlášek do konkurzu o „Cenu za organickou chemii v roce 2014“ je stanovena na 15. červen 2014 (případně jde o datum poštovního razítka na poslané přihlášce). Podmínky a náležitosti přihlášky zůstávají prakticky stejné jako v minulých letech: Cena se uděluje za práce v oblasti organické chemie uchazečům české státní příslušnosti **do věku 35 let**, kteří nemají hlavní pracovní poměr v zahraničí (postdoktorská stáž se za takový pracovní poměr nepovažuje). Věkové vymezení znamená, že **uchazeč nesmí dosáhnout věku 36 let v roce soutěže**. Obvyklým obsahem přihlášených prací je organická syntéza, avšak přihlášené práce mohou rovněž zahrnovat studie mechanismů. Na druhé straně do působnosti Ceny nepřísluší práce z analytické oblasti (včetně strukturální analýzy), měření fyzikálních dat (m.j. měření různých rovnováh a energetických veličin), studie substitučního efektu a výpočetní chemie. Uchazeči o Cenu se zpravidla přihlašují sami na sekretariátu České společnosti chemické (Novotného lávka 5, 116 68 Praha 1), návrh však mohou podat také kolegové, instituce a rovněž vědecké rady a senáty. *Cena je udělována nejlepšímu souboru prací bez ohledu na to, kolikrát se autor o ni ucházel. Od r. 2005 je Cena je dotována částkou 3300 USD.* Tato úprava odpovídá původní dotaci a týká se obou Cen.

Uzávěrka přihlášek do konkurzu o „Cenu za bioorganickou a bioorganickou chemii v roce 2014“ je stanovena na 31. březen 2014. Rovněž tato Cena se neuděluje za různé druhy testování nebo měření vlastností sloučenin a různých agregátů. Na druhé straně jsou výsledky testů vítány jako doprovodné údaje, které dokreslují vlastnosti prezentovaných sloučenin. Přihlášky musejí obsahovat stejně náležitosti jako přihlášky do konkurzu o Cenu za organickou chemii.

K přihlášce je potřeba zaslat následující materiály: 1) Hlavní částí přihlášky jsou **separáty publikovaných prací přihlášených do soutěže** a 2) k nim zpracovaný **souhrn vlastních výsledků** s příslušným komentářem v rozsahu do 8 běžných strojopisných stran. Souhrn obsahuje vhodná schémata a struktury ilustrující výsledky uchazeče, dále jsou v souhrnu uvedeny citace jen na vlastní práce, které jsou předmětem soutěže. 3) V **seznamu publikací uchazeče** se hvězdičkou označí autor, který práci podal do redakce a vyřizoval komunikaci s redakcí. Řada publikací vzniká týmovou činností a z toho důvodu je potřeba v seznamu publikací uvést, jak se uchazeč na publikaci a jejím zveřejnění podílel, např. šlo (zčásti) o výsledky diplomové práce, výsledky doktorské práce, (zčásti) řešení grantu získaného uchazečem, samostatně řešenou část projektu, vlastní projekt, výsledky diplomanta nebo doktoranda – které uchazeč školil apod. Nedoporučuje se hodnotit svůj podíl procentuálně. 4) Příložený **životopis** by měl zachytit odborný vývoj, např. absolvovanou střední školu, téma diplomové (magisterské) a doktorské (kandidátské disertace) se jménem školitele, pracovní zařazení, získaná ocenění, stáže a jejich tematické zaměření, získané granty apod. Hodnotící komise posuzuje soubory prací nezávisle na doporuče-

ních školitelů, vedoucích apod., takže přihláška je plně platná a plnohodnotná i bez těchto doporučení.

Změna proti dřívějšímu: Uchazeč podá souhrn vlastních výsledků, seznam publikací a životopis „na papíře“ jako dosud a k tomu tyto materiály dodá v elektronické verzi (formát Word). K tomu přidá elektronickou verzi separátů svých prací na vhodném nosiči.

Na závěr zdůraznění – **uzávěrka do soutěže o Cenu Alfreda Badera za bioorganickou a bioorganickou chemii je již 31. března 2014 a do soutěže o Cenu za organickou chemii je 15. června 2014**, což může být v obou případech datum poštovního razítka na zásilce s přihláškou.

*Oldřich Paleta, předseda Komise pro Cenu Alfreda Badera za organickou chemii
Tomáš Trnka, předseda Komise pro Cenu Alfreda Badera za bioorganickou a bioorganickou chemii*

Ing. Miloslav Rotrekl je čestným členem České společnosti chemické

Na slavnostním zahájení VI. výstavy LABOREXPO 25. září 2013 bylo panu Ing. Miloslavu Rotreklvi uděleno čestné členství ČSCH. Ing. Rotrekl je odborné chemické veřejnosti znám jako zakladatel a šéfredaktor CHEMAGAZINU a organizátor výstav LABOREXPO. Narodil se 26. července 1948 v jihomoravských Litobratřích a od roku 1952 žil s rodiči v Pardubicích. Před nástupem na vojenskou prezenční službu pracoval ve VCHZ Synthesia jako dělník ve výrobě meziproductů barviv v Rybitví, kam se i následně po vojně v roce 1969 vrátil. Do roku 1979 pracoval jako dělník a mistr v nové výrobě na extruzi methylmetakrylátů. Mezitím absolvoval večerní SPŠCH a v roce 1977 začal dálkově studovat VŠCHT Pardubice, kterou dokončil v roce 1983 se specializací Analytická a fyzikální chemie. V roce 1979 začal pracovat v laboratoři stabilit výbušin a prachů ve VÚ průmyslové chemie, kterou od roku 1982 vedl. V roce 1984 nastoupil jako technolog do dnešní Explosie. V letech 1984–86 absolvoval postgraduální studium Automatizovaných systémů řízení technologických procesů na VŠCHT Pardubice. V roce 1986 se vrátil zpět do VÚPCH do laboratoře mechanoskopie hnacích hmot. V roce 1988 se stal hlavním

technologem připravované investiční akce Herbicidy II. Po jejím zrušení pracoval až do poloviny roku 1991 jako technolog formulace herbicidů. Vydavatelství časopisu CHEMAGAZÍN založil v roce 1990 a od konce druhé poloviny devadesátých let zůstává jeho stěžejní aktivitou podnikání. Časopis vydávaný s dvouměsíční periodicitou je vyhledávaný nejen čtenáři z technologických oddělení, technického managementu, údržby, výzkumu a vývoje a procesní a laboratorní kontroly chemického průmyslu, ale také chemiky z akademické sféry. V roce 2004 začal společně se svým synem Tomášem připravovat nový projekt LABOREXPO, jediné a největší výstavy analytické a laboratorní techniky, která již stejně jako CHEMAGAZÍN vstoupila do povědomí české chemické veřejnosti. Ing. Miloslav Rotrekl je stále, nyní již jako důchodce, šéfredaktorem CHEMAGAZÍNU a je odpovědný za jeho odbornou a obsahovou stránku. Na starosti má také přípravu doprovodného odborného programu výstavy LABOREXPO, v rámci kterého jsou prezentovány úspěšné domácí vědecké projekty a moderní analytické metody a laboratorní technika. Na přípravě programu výstavy pravidelně spolupracuje s Českou společností chemickou, jejímž je členem. Ve svém volném čase se řadu let věnoval dokončení myšlenky svého otce, Ing. Bedřicha Rotrekla, zrcadlovému solárnímu kolektoru. Navrhl a sestavil samočinně naváděný parabolický kolektor s unikátní plastovou trubicí. V roce 2004 získal osvědčení o zápisu užitného vzoru a v roce 2008 mu byl udělen patent.

Miloslav Rotrekl patří k těm členům ČSCH, kteří ve svých pracovních pozicích trvale spolupracují se Společností a propagují její odborné a společenské aktivity. CHEMAGAZÍN je mediálním partnerem sjezdů Asociací českých a slovenských chemických společností a aktivně se na jejich medializaci podílí. Propagace akcí ČSCH výrazně přispívá k účasti odborníků ze sféry chemického průmyslu. ČSCH udělením „Čestného členství“ panu Miloslavu Rotreklvi ocenila jeho významný přínos pro Společnost v oblasti její propagace a podpory v kontaktech s výrobními podniky.

Vilém Šimánek

Akce v ČR a v zahraničí

rubriku kompiluje Lukáš Drašar, drasarl@centrum.cz

Rubrika nabyla takového rozsahu, že ji není možno publikovat v klasické tištěné podobě. Je k dispozici na webu na adrese <http://konference.drasar.com>. Pokud má některý čtenář potíže s vyhledáváním na webu, může se

o pomoc obrátit na sekretariát ČSCH. Tato rubrika nabyla již tak významného rozsahu, že ji po dohodě přebírají i některé zahraniční chemické společnosti.

Odborná setkání

3rd European Lipidomic Meeting byl letos v Pardubicích

Lipidomická sekce České společnosti pro biochemii a molekulární biologii (ČSBMB) a Fakulta chemicko-technologická Univerzity Pardubice uspořádaly v Pardubicích ve dnech 2. – 4. července 2013 mezinárodní konferenci s názvem 3rd European Lipidomic Meeting (ELM 2013): <http://elm2013.uochb.cas.cz/>. Tato akce volně navázala na předchozí dva ročníky pořádané v rakouském Grazu v letech 2010 a 2012. Od letošního roku je plánováno každoroční pořádání této konference v různých evropských městech. Hlavní myšlenkou konference je spojit vědce z různých vědních oblastí (chemie, biologie, medicína, výživa, atd.) se společným zájmem o lipidy a lipidomiku. Lipidomická analýza s využitím hmotnostní spektrometrie patřila podle očekávání mezi klíčová témata konference, což bylo doplněno řadou prezentací z oblasti biologie a medicíny. Komplementární přístup vědců z různých vědních oborů je hnací silou lepšího poznání biologických funkcí lipidů a jejich metabolismu.

Celkem se konference zúčastnilo 116 účastníků z 21 zemí a 5 kontinentů. Účastníci konference měli příležitost vyslechnout celkem 32 přednášek, 2 krátké předkonferenční kurzy (Xianlin Han – Shotgun Lipidomics, Michal Holčapek – LC/MS in Lipidomics) a také vidět prezentaci 48 plakátových sdělení. Na konferenci přijala pozvání řada klíčových lipidomických osobností z celého světa, jak je vidět ze seznamu zvaných přednášejících včetně prezidenta amerického konsorcia Lipid MAPS prof. Dennise:

- Edward A. Dennis (University of California, San Diego, La Jolla, USA),
- Stephen J. Blanksby (University of Wollongong, Australia),
- Andrej Shevchenko (Max Planck Institute of Molecular Cell Biology and Genetics, Dresden, Germany),
- Xianlin Han (Sanford-Burnham Medical Research Institute, Orlando, USA),
- Kim Ekroos (Zora Biosciences, Espoo, Finland),
- Bernhard Spengler (University of Giessen, Germany),
- Harald C. Köfeler (Medical University of Graz, Austria).

Na závěr konference vybrala mezinárodní odborná porota 3 nejlepší plakátová sdělení, která byla ohodnocena cenou poroty. Dvě udělené ceny zůstaly na domácí půdě Univerzity Pardubice (Miroslav Lísa – Chiral HPLC/MS characterization of enantiomeric composition of triacylglycerols and other nonpolar lipids, Eva Cífková – Nontargeted lipidomic characterization of porcine organs using HILIC-HPLC/ESI-MS) a jedno ocenění putuje do Rakouska (Andreas Üllen – Myeloperoxidase-derived oxidants induce blood-brain barrier dysfunction: dietary benefits of natural polyphenols?).

Odborný program byl doplněn bohatým společen-



Foto: Lenka Kloudová z pořádatelky firmy C-IN

ským programem a vynikajícím cateringem firmy Bonté. První uvítací večer proběhl v prostorách pardubického zámku s možností prohlídky nově otevřené zámecké kaple, výstavy českého skla a výstavy motýlů. Společenský večer ve středu večer byl uspořádán v restauraci Dašické sklepy v prostorách bývalého pivovaru s vystoupením skupiny historického šermu a závěrečné ohňové show. Akce se vydařila podle našich představ, za což patří poděkování i pořádatelce agentuře firmě C-IN. Příští rok bude lipidomické setkání opět v národním formátu organizované doc. Valterovou. Detaily budou včas oznámeny na webu ČSBMB: <http://www.csmbmb.cz/>

*Michal Holčapek
předseda organizačního výboru konference*

64. výroční kongres Mezinárodní elektrochemické společnosti v Queretaru

Tento zajímavý kongres proběhl ve dnech 8. až 13. 9. 2013 v prostředí nádherného kongresového centra v Queretaru, jednom z nejkrásnějších mexických měst, které je památkovou rezervací UNESCO. Velmi dobře zorganizovaný kongres příkladným způsobem demonstroval možnosti elektrochemie při řešení stále složitějších problémů současného světa. 14 paralelně probíhajících symposií, včetně poprvé zařazeného symposia o výuce elektrochemie, bylo vhodně uvedeno velmi kvalitními plenárními přednáškami. S potěšením lze konstatovat kvalitní zastoupení českých elektrochemiků na této konferenci reprezentované 4 přednáškami. Mimořádně potěšující je i udělení Ceny ISE za environmentální elektrochemii doc. Vojtěchu Adamovi z VUT Brno, kterému tímto jménem celé elektrochemické obce srdečně blahopřeji. Závěrem bych rád upozornil na řadu dalších zajímavých akcí ISE, o nichž se lze informovat na URL <http://www.ise-online.org/>.

Účast zástupce České společnosti chemické na práci ISE a na tomto kongresu byla umožněna jednak grantem Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu INGO Projekt LG 13059 (2013) (Reprezentace České analytické chemie v Evropské asociaci pro chemické a molekulární vědy) a jednak laskavou podporou firem Merck s.r.o. Praha a ChromSpec, Praha. Je milou povinností autora poděkovat výše uvedeným firmám za jejich pochopení a podporu aktivit České společnosti chemické a odborné skupiny analytické chemie. Všechny materiály související s tímto kongresem jsou k dispozici na níže uvedené adrese.

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

Veletrh nápadů učitelů chemie II

Vždy, když se sejdou lidé se stejnými zájmy, je to příjemné a povzbuzující. Nejinak to bylo 4. a 5. října na Gymnáziu Pierra de Coubertina v Táboře, kde se pod patronací odborné skupiny pro chemické vzdělávání ČSCH sešlo padesát učitelů chemie. Bylo mezi nimi též několik zástupců vysokých škol vychovávajících učitele, kteří prezentovali různé možnosti dalšího vzdělávání formou nabídek multimediálních programů z vlastních pracovišť a účasti na probíhajících projektech.

Začínalo se už tradičně v oboru chemických výrob, které bohužel z výuky úplně zmizely. Prvním hostitelem byl závod Milcom v Táboře, ve kterém si učitelé učinili rámcovou představu o výrobě syřidel pro výrobu sýrů, ale i o přídavných látkách do pečiva. Zajímavé byly informace z výzkumu v oboru chuťových a barvicích látek, které zákazník v pečivu oceňuje. Vyučující si nakupovali kultury pro domácí výrobu kysaných mléčných nápojů jako výchozí suroviny pro laboratorní práce žáků. Druhým navštíveným závodem byla Madeta v Plané nad Lužnicí, kde je též navazující výrobní program výroby polotvrdých a tvrdých sýrů, pomazánkového másla, jogurtů a tvarohu. Předností těchto produktů je, že jsou bez přídavných látek, které by měly, jako v případě pečiva, zlepšovat jejich senzorické vlastnosti.

V úvodním slově a prezentaci se prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc. ohlédla za minulým ročníkem a uvedla současné trendy přírodovědného vzdělávání v ČR a v EU. Představila též projekt Věda není žádná věda, který vychází ze sympatického „žakovský pokus jako východisko pro výuku přírodních věd“. Dalšími příspěvky byly: Motivační prostředky pro výuku chemie, Přírodní vědy moderně a v týmu, Náměty, nápady, návody a materiály pro chemické vzdělávání, Koncipování předmětu „Přírodověda“ na I. stupni ZŠ, Voda jako.., Efektivita využití PowerPointových prezentací, PSP „strašák“ nebo „kámoš“ studenta, „Nano“ hrou aneb Jak přiblížit nanosvět pomocí demon-

strací, (Ne)viditelná DNA?, Výuka jaderné chemie a chemie f-prvků na středních školách, Jak dál v počítačem podporovaném školním chemickém experimentu, Chemie s Vernierem, Počítačové simulace ve výuce chemie, Zkušenosti s používáním interaktivních tabulí, Vybavení škol ve vztahu k experimentům a hypermediálním programům, Problematika tvorby vzorců ve výuce chemie, Pokusy na rozhraní fyziky a chemie, Výpočtové úlohy zaměřené na problematiku složení roztoků, Redukce manganistanu draselného peroxoboritanem sodným, Školní chemické experimenty s mikrovlnnou troubou, Jednoduché laboratorní práce, Ohřívání nápojů, Náměty pro demonstrační pokusy a Zajímavé pokusy pro osvojování učiva chemie. Závěr tvořila diskuse na předložené náměty ze života učitele chemie.

Z uvedených názvů je patrná různorodost témat, z nichž některá by si často zasloužila větší pozornost a zpracování.

Celou akci po organizační stránce bezvadně zajišťovala osvědčená firma Voleman.

Organizační výbor této akce ve složení: prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc., prof. PhDr. Martin Bílek, Ph.D a RNDr. Petr Koloros, Ph.D, se na základě této úspěšné akce dohodl, že další pokračování se bude konat příští rok v Brně.

Petr Koloros

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

44. výroční zasedání DAC EuCheMS proběhlo ve Varšavě 25. srpna 2013 za účasti 30 členů zastupujících 23 zemí. Prof. Worsfold (UK) byl na další 2 roky zvolen předsedou řídicího výboru DAC EuChEMS a prof. Berek (ČR), prof. Buchberger (Rakousko), prof. Razić (Srbsko), prof. Rolando (Francie) a prof. Colmsjo (Švédsko) byli zvoleni členy řídicího výboru na další funkční období. Byla pojednána příprava nadcházející konference EUROANALYSIS 2013 ve Varšavě, příprava konference EUROANALYSIS 2015 v Bordeaux a schváleno konání konference EUROANALYSIS 2017 ve Stockholmu. O pořádání konference EUROANALYSIS 2019 projevil zájem Istanbul. Byla projednána činnost jednotlivých studijních skupin, otázka www stránek této divize, spolupráce s ostatními divizemi, spolupráce s nakladatelstvím Springer a schválena řada akcí organizovaných ve spolupráci s DAC EuChEMS. Příští zasedání se bude konat 30. 8. 2014 v Istanbulu v předvečer Evropského chemického kongresu (ECC).

Plenárnímu zasedání DAC EuChEMS předcházelo zasedání jeho řídicího výboru, jehož je prof. Berek voleným členem a kde byly projednány zejména otázky souvi-

sející s řídicí činností výboru, spolupráce s exekutivou EuChEMS a s dalšími divizemi, příprava „European Analytical Column“ a otázky dalších aktivit DAC. Toto zasedání navazovalo na zasedání řídicího výboru DAC na Kypru ve dnech 6.–13.4. 2013, které bylo spojeno se seminářem organizovaným Kyperskou chemickou společností zaměřeným na moderní trendy v analytické chemii. Zde byla projednána zejména další koncepce práce DAC a konferencí EUROANALYSIS a další otázky související s plánovanými aktivitami této divize.

Účast zástupce České společnosti chemické na práci DAC EuChEMS byla umožněna jednak grantem Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu INGO II Projekt LG13059 (2013) (Reprezentace české analytické chemie v Evropské asociaci pro chemické a molekulární vědy) a jednak laskavou podporou firem Merck s.r.o. Praha a ChromSpec, Praha. Je milou povinností autora poděkovat výše uvedeným firmám za jejich pochopení a podporu aktivit České společnosti chemické a odborné skupiny analytické chemie. Všechny materiály související s činností DAC EuChEMS jsou k dispozici na níže uvedené adrese.

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

14. Škola hmotnostní spektrometrie v Jeseníku

Ve dnech 16. až 20. září 2013 se v areálu Priessnitzových léčebných lázní v Jeseníku uskutečnil již 14. ročník Školy hmotnostní spektrometrie. Na organizaci letošního ročníku spolupracovala Spektroskopická společnost Jana Marka Marci s Ústavem organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i. v Praze. Škola hmotnostní spektrometrie tradičně slouží především k předávání nových znalostí a zkušeností v rychle se vyvíjejícím oboru hmotnostní spektrometrie. Je koncipovaná jako výukový kurz s přednáškami různé úrovně náročnosti, a je tak vhodná nejen pro nováčky v oboru, ale i pro zkušené specialisty. Škola je současně prostorem pro odborné diskuse a navazování profesních kontaktů. Odborný program letošního ročníku měl podtitul „Od základů k „omikám“ a zahrnoval přednášky věnované základním principům hmotnostní spektrometrie, způsobům ionizace a analýzy iontů, spojení chromatografických a elektromigračních technik s hmotnostní spektrometrií a kvantifikaci analytů. Klíčovou součástí programu byly také příspěvky věnované využití hmotnostní spektrometrie v proteomice a metabolomice a interpretaci a zpracování dat. Stejně jako v předchozích třech letech proběhlo slavnostní vyhlášení vítěze Ceny Vladimíra Hanuše a Petra Sedmery v kategorii Hmotnostní spektrometrie. Vítěz letošního ročníku, doc. Mgr. Jan Preisler, Ph.D. z Masarykovy Univerzity v Brně, poté představil oceněnou práci v příspěvku nazvaném „Tepelné odpařování diodo-

vým laserem pro hmotnostní spektrometrii indukčně vázaného plazmatu“. Škola hmotnostní spektrometrie kromě odborných přednášek tradičně nabídla i společenské a sportovně-poznávací programy. V rámci společenských večerů vystoupila skupina Jelení loje se svou kabaretní show, Šermířský spolek Jeseník spolu se skupinou scénického šermu Folleto a k poslechu i tanci zahrála místní kapela KM Band. Odborný i večerní společenský program se odehrával v kongresovém sálu Priessnitzových léčebných lázní a přilehlých prostorách. Účastníci byli ubytováni v několika lázeňských domech v bezprostředním okolí kongresového sálu a mohli tak plně vychutnat příjemnou lázeňskou atmosféru. Středeční dopoledne bylo již tradičně odpočinkové a nabídlo možnost relaxovat a poznávat Lázně Jeseník i jejich překrásné okolí. Pro zájemce byly zorganizovány výlety na přečerpávací vodní elektrárnu Dlouhé stráně, na Rejvíz a hornický skanzen u Zlatých Hor a do jeskyně Na Pomezí. K příjemně strávenému dopoledni napomohlo i slunečné počasí v jinak spíše zamračeném a deštivém týdnu. Letošní ročník Školy hmotnostní spektrometrie přilákal rekordních 253 účastníků, kteří vyslechli 49 přednášek od 34 lektorů. Všem přednášejícím je nutné poděkovat za skvělou práci při přípravě a prezentaci svých příspěvků. Velký dík patří také organizátorům letošního ročníku a pracovníkům Priessnitzových léčebných lázní, kteří věnovali svůj čas a úsilí zajištění této poměrně rozsáhlé a logisticky náročné akce. Na závěr bych chtěl poděkovat partnerům z komerční sféry, bez jejichž finanční a další podpory by nebylo pořádání školy v současném formátu vůbec myslitelné. Hlavními partnery letošního ročníku byly společnosti AB SCIEX, Bruker, HPST, Thermo Fisher Scientific, Waters a LECO, dále přispěly společnosti Chromservis, Labicom, PE Systems, Shimadzu, Sigma-Aldricha a IonBench. Patnáctý ročník Školy hmotnostní spektrometrie v roce 2014 připravuje Spektroskopická společnost Jana Marka Marci ve spolupráci s Masarykovou Univerzitou v Brně.

Na viděnou na příštím ročníku Školy!

*Josef Cvačka
Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.*

9th International Conference on Polysaccharides-Glycoscience

Ve dnech 6.–8. 11. 2013 se konala na Novotného Lávce v Praze v pořadí již devátá mezinárodní konference Polysaccharides-Glycoscience, jejímiž organizátory byla Česká společnost chemická a Ústav sacharidů a cereálií VŠCHT Praha.

Konferenci navštívilo 90 účastníků, bylo na ní zastoupeno 10 států: Bulharsko, Česká republika, Francie, Maďarsko, Německo, Polsko, Rakousko, Slovensko, Spojené státy a Velká Británie. Již tradičně se konference účastnili technologové českého škrobárenského průmyslu. Na programu konference bylo 18 přednášek a 51 vývěsek ve dvou posterových sekcích. Konferenci podpořila organiza-



Foto: Ivan Jablonský

ce European Science Foundation (Euroglycoforum Research Networking Programme) a společností TEREZIA COMPANY, NICOLET CZ, Lyckeby Amylex, Amylon, SciTech, MANEKO, SHIMADZU a NOACK.

Přednášky byly rozčleněny do následujících sekcí:

1. Chemické a biochemické modifikace polysacharidů (předsedající prof. Serge Pérez)
2. Interakce polysacharidů (předsedající prof. Jana Čopíková)
3. Izolace, charakterizace a syntéza polysacharidů (předsedající Dr. Ján Hirsch)
4. Polysacharidy obsažené v obilných zrnech (předsedající Dr. Marcela Sluková)
5. Škrob (předsedající prof. Krzysztof Surówka)
6. Hydrolýza a fermentace polysacharidů (předsedající prof. Janusz Kapusniak)

V 1. sekci zaujala zvaná přednáška prof. S. Flitschové z University Manchester, zabývající se studiem glykoenzymové aktivity. Další zvanou přednáškou (2. sekce) byl přehledový referát prof. K. Surówki z krakovské Zemědělské univerzity, týkající se interakcí protein-polysacharid. Ve 3. sekci upoutal pozornost referát B. Wiege z Max Rubnerova institutu z německého Detmoldu, zabývající se izolací a charakterizací arabinoxylanů z pšeničných otrub. Ve 4. sekci vystoupila Dr. M. Raksze-

gi z Maďarské akademie věd s příspěvkem na téma: Produkce pšenice s upraveným obsahem polysacharidů k zdravější lidské spotřebě. Klíčovým přednášejícím 5. sekce byl prof. S. Pérez z CNRS, Centra základního výzkumu makromolekul rostlin v Grenoblu, který hovořil o strukturním uspořádání škrobového zrna. V této sekci byl zařazen i další klíčový přednášející – prof. J. Kapusniak, z University Jan Długosze v Czesochowé, jehož příspěvek byl věnován produktům tepelné modifikace škrobu pro potraviny a zdravou výživu. V poslední sekci měl klíčovou ústní prezentaci prof. M. Rychtera z Ústavu biotechnologie VŠCHT Praha, přednáška se zabývala novými trendy ve výrobě biopaliv.

Jako v předchozích ročnících byly i letos vyhlášeny nejlepší přednášky a vývěsky pro mladé badatele. V ústních prezentacích se nejlépe umístily tyto přednášky: R. Bleha, M. A. Coimbra, J. Čopíková, C. Passos, A. Synytsya (Ústav sacharidů a cereálií VŠCHT Praha a Univerzita Aveiro): Izolace, struktura a složení polysacharidů z dřevokazných hub
T. Uhlířová, E. Gregorová, W. Pabst, M. Veselý (Ústav skla a keramiky VŠCHT Praha): Vliv typu a množství škrobu na biologické pění suspenzí oxidu hlinitého.

Za nejlepší poster byl vyhlášen:

J. Merelová, S. Henke, P. Bartošková, A. Synytsya, J. Čopíková (Ústav sacharidů a cereálií VŠCHT Praha): Využití statistických metod při hodnocení cukrovinkářského želé.

Vědecky zaměřené setkání doplnil kulturní program – koncert vážné a jazzové hudby v podání dívčího Eve Quartetu a společenské setkání při sklence vína v Art Café v Colloredo-Mansfeldském paláci.

Evžen Šárka, Jana Čopíková

Členská oznámení a služby

Noví členové ČSCH 2013

Adam Rostislav, Mgr., studující, FJFI ČVUT Praha
Almonasy Numan, Ing., Ph.D., Univerzita Pardubice
Androvič Ladislav, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Babjaková Eva, Ing., studující, UTB
Balzerová Anna, Mgr., studující, PřF UP Olomouc
Bartl Pavel, Bc., studující, FJFI ČVUT Praha
Bartošková Pavla, Ing., studující, VŠCHT Praha
Bleha Roman, Ing., studující, VŠCHT Praha
Branná Petra, Ing., studující, UTB Zlín
Červenák Jaroslav, Bc., studující, FJFI ČVUT Praha
Červenka Tomáš, Ing. Bc., Laird technologies s.r.o. Liberec
Činčalová Kateřina, Bc., studující, VŠCHT
Čížková Helena, Ing., Ph.D., VŠCHT Praha
Donkeng Dazie Joel, Mgr., studující, ÚFCH J.H. AV ČR Praha
Doroshenko Iaroslav Bc., studující, PřF MU Brno
Doušová Hana, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Dušek Jan, Ing., studující, Univerzita Pardubice

Eisner Dominik, studující, VŠCHT Praha
Fauknerová-Matějčková Jana, RNDr., 3. LF UK Praha
Foller Bronislav, Ing., Ph.D., Foller, s.r.o. Brno
Hanek Radek, Ing., Malé Žernoseky
Hanus Václav, Ing., ČEZ, a.s., JE Temelín
Hejnar Ondřej, Mgr., PřF OP Olomouc
Hermanová Jana, Ing., studující, UTB Zlín
Herzán Přemysl, Ing., Praha
Hodík Tomáš, VŠCHT Praha
Horký Pavel, Mgr., FaF UK Hradec Králové
Horníček Jan, Ing., VŠCHT Praha
Hotová Gabriela, studující, PřF Ostravské Univerzity
Huličiak Miroslav, Mgr., studující, PřF UP Olomouc
Husáková Lenka, Ing., Ph.D., Univerzita Pardubice
Chlupatý Tomáš, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Jaček Martin, Mgr., 3. LF UK Praha
Janoušek Jiří, Bc., studující, VŠCHT Praha
Jořenek Miroslav, Mgr., studující, PřF UP Olomouc
Kammel Richard, Ing., studující, Univerzita Pardubice

- Kamrádek Michal, Ing.**, studující, VŠCHT Praha
Kantnerová Kristýna, studující, ÚFCH J.H. AV ČR Praha
Klíkar Milan, Bc., studující, Univerzita Pardubice
Koktan Jakub, Bc., studující, VŠCHT Praha
Koupilová Iva, studující, VŠCHT Praha
Kovářík Jiří, Ing., VŠCHT Praha
Kovářík Petr, Centrum výzkumu Řež s.r.o., Řež
Krausová Ivana, RNDr., ÚJF AV ČR Řež
Kreps František, Ing., studující, STU Bratislava
Kričfaluši Dana, doc. Paedr., CSc., Ostravská univerzita
Křížan Martin, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Kvítek Ondřej, Ing., studující, VŠCHT Praha
Lebeda Ondřej, doc. Ing., Ph.D., ÚJF AV ČR Řež
Líbalová Martina, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Libánský Milan, Mgr., studující, PŘF UK Praha
Madea Dominik, studující, SPŠ Otrokovice
Mastný Libor, Ing., CSc., VŠCHT Praha
Mastný Martin, Ing., VŠCHT Praha
Mátlová Veronika, Ing., studující, VŠCHT Praha
Michaljaničová Iva, Ing., studující, VŠCHT Praha
Miklík David, Bc., studující, Univerzita Pardubice
Mizera Jiří, Ing., Ph.D., ÚJF AV ČR Řež
Navrátil Rudolf, Mgr., studující, PŘF MU Brno
Novotný Martin, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Olejník Roman, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Parchaňský Václav, Ing., studující, ÚOCHB AV ČR Praha
Paúrová Monika, Mgr., studující, PŘF UK Praha
Pejchalová Marcela, Ing., Ph.D., Univerzita Pardubice
Pěnkavová Věra, Ing., ÚCHP AV ČR Praha
Pernica Marek, Bc., studující, PŘF MU Brno
Petrů Jiří, Ing., studující, VŠCHT Praha
Pilařová Iveta, RNDr. Mgr., studující, PŘF MU Brno
Pluháček Tomáš, Bc., studující, PŘF UP Olomouc
Pniok Miroslav, Mgr., studující, PŘF UK Praha
Poryvai Anna, Bc., studující, VŠCHT Praha
Prášilová Jana, Mgr., PŘF UP Olomouc
Preininger Ondřej, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Procházková Lenka, Ing., studující, FJFI ČVUT Praha
Procházková Soňa, studující, PŘF UK Praha
Přáda Adam, studující, Gymnázium Ostrov
Pyszková Michaela, Mgr., studující, Ústav lék. chemie a biochemie UP Olomouc
Rozsypalová Silvie, Ing., Ph.D., VŠB-TU Ostrava
Ruhswurmová Nikola, Ing., studující, VŠCHT Praha
Sas Daniel, Ing., Ph.D., Univerzita obrany Vyškov
Sedlářová Barbora, Ing., VÚV TGM, Praha
Sládková Veronika, Ing., studující, VŠCHT Praha
Soural Miroslav, doc. RNDr., Ph.D., PŘF UP Olomouc
Sutrová veronika, studující, PŘF UK Praha
Ševčík Radek, Mgr., studující, PŘF MU Brno
Šťastný Martin, Bc., studující, UJEP Ústí nad Labem
Taubner Tomáš, Ing., studující, VŠCHT Praha
Teslíková Ivana, Ing., studující, VŠB Ostrava
Tilková Alena, Ing., studující, VŠB Ostrava
Tomanová Pavla, Bc., studující, VŠCHT Praha
Třmínková Pavlína, Mgr., CEPHA s.r.o. Plzeň
Tůma Petr doc. RNDr., Ph.D., 3. LF UK Praha
Urbanová Iva, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Váňa Lubomír, Bc., studující, VŠCHT Praha
Večerková Renata, Mgr., studující, Ústav lék. chemie a biochemie UP Olomouc
Veselý Jiří, Ing., Cayman Pharma Neratovice
Veverková Lenka, Ing. Ph.D., PŘF UP Olomouc
Vít Jan, Ing., Centrum výzkumu Řež s.r.o., Husinec Řež
Vlček Jakub, Mgr., studující, PŘF UP Olomouc
Vojtajová Jitka, Bc., studující, ZČU Plzeň
Vosmanská Vladimíra, Ing., studující, VŠCHT Praha
Vrbíková Lenka, Ing., studující, STU Bratislava
Vykoukal Vít, Bc., studující, PŘF MU Brno
Zábranská Marie, Mgr., studující, ÚOCHB AV ČR Praha
Zimmermann Tomáš, studující, VŠCHT Praha
Zlá Simona, Ing., Ph.D., VŠB-TU Ostrava
Zvonková Marcela, Ing., studující, Univerzita Pardubice
Žaludová Monika, Ing., Ph.D., VŠB-TU Ostrava

Střípky a klípky o světových chemících

Frans Maurits Jaeger 1877–1945

Frans Maurits Jaeger, profesor na univerzite v Groningen v severnom Holandsku, patrí medzi osobnosti svetovej chémie so vzťahom k Československu, ktoré však nezaslúžene upadli do zabudnutia.

F. M. Jaeger sa narodil 11. mája 1877 v Haagu ako najstarší z troch synov armádneho dôstojníka, ktorý po odchode z vojska vyučoval matematiku na gymnáziu v Haagu. Mladý Jaeger absolvoval základnú a strednú školu v rodisku a od roku 1894 študoval chémiu na univerzite v Amsterdame. Tam získal v roku 1900 doktorát a ďalšie dva roky strávil štúdiom kryštalografie v Berlíne. Na jeseň roku 1902 začal vyučovať chémiu na univerzite Zaandame a v roku 1904 sa stal súkromným docentom na univerzite v Amsterdame. Od roku 1908 až do konca života pôsobil v Groningene ako docent a neskoršie (1909) ako profesor anorganickej a fyzikálnej chémie. Tam vybudoval

pracovisko pre výskum silikátov na základe skúseností a poznatkov zo študijného pobytu v USA (1910–1911).

Vo vedeckej práci sa zamerával na štúdium štruktúry zeolitov a osobitne sú cenené jeho práce o ultramarínoch. Dlhšia séria publikácií sa týka merania špecifických teplot kovov pri vysokých teplotách až do 1600 °C.

Na univerzitu v Groningene prišiel v roku 1913 mladý český chemik Antonín Šimek a našiel tam dobré uplatnenie v Jaegerovej skupine zaoberajúcej sa silikátmi. Sľubne sa rozvíjajúcu vedeckú dráhu prerušila 1. svetová vojna. Po jej skončení sa Šimek vrátil do Holandska, ale ani jeho druhý pobyt tam nemal dlhé trvanie, pretože dostal menovanie za profesora na novú univerzitu v Brne. Priateľský vzťah s profesorom Jaegerom bol však silný a pretrval celý život. Od neho sa dajú odvodzovať Jaegerove kontakty s československou chémiou v mezivojnovom období.

V marci roku 1930 navštívil Jaeger Prahu, kde mal prednášku *Molecular configuration and optical activity* na

Karlovej univerzite¹. V priebehu ďalších rokov vyšlo v Chemických listoch niekoľko Jaegerových prác, ktoré preložil profesor Šimek. Keď v roku 1934 holandský časopis *Chemisch Weekblad* vydal osobitné číslo venované 25. výročiu menovania F. M. Jaegera za profesora, v ktorom boli články jeho spolupracovníkov o rozličných aspektoch jeho činnosti, bol tam aj príspevok od A. Šimka.

V roku 1932 zjazd Československej chemickej spoločnosti zvolil prof. Jaegera (spolu s M. Curie-Sklodowskou, F. Cottrellom a E. Votočkom) za čestného člena Spoločnosti. Ako referovali *Chemické listy* „volba sa stala bez debaty, jednomyslné za spontánneho potlesku všetch prítomných, čož svedčí o správnom výbere členů“.

Ako je známe^{2,3}, profesor A. Šimek sa od začiatku 2. svetovej vojny zapojil do domáceho odboja, v roku 1941 bol uväznený a v nasledujúcom roku v Mauthausene popravený. Nie je jasné, ako sa Jaeger dozvedel o jeho smrti, ale uverejnili obšírny nekrológ s fotografiou a súpisom niektorých publikácií⁴. J. Heyrovský v nekrológu za A. Šimkom, ktorým otváral povojnové vydávanie *Collection*⁵ tento Jaegerov článok spomína, ale s neúplnou citáciou. Príslušný ročník *Chemisch Weekblad* sa v českých ani slovenských knižniciach nenachádza a tento zaujímavý a významný nekrológ nie je u nás dostupný. Zo strany autora sa jednalo o odvážny čin v podmienkach tuhého okupačného režimu. Je zaujímavé, že anotácia sa objavila v nemeckom referátovom časopise (*Chem. Zentralblatt*), ktorý sa dostal do Londýna. Tam si ho všimol anglický chemik Gerald Druce, ktorý Šimka poznal z predvojnových návštev Československa a napísal krátky nekrológ do *Nature*⁶.

Profesor Jaeger zomrel 2. marca 1945. Groningen leží celkom na severe Holandska a tak spojenecké armády postupujúce proti húževnatému nemeckému odporu z juhu sa tam dostali až po nemeckej kapitulácii. V zime 1944–1945 panovali v Holandsku mimoriadne neutešené pomery čo do zásobovania základnými životnými potrebami a toto obdobie vošlo do dejín ako „hladná zima“. Jeho nekrológy^{7,8} vyšli až na jar 1947. V Československu, kde bol čestným členom Chemickej spoločnosti, žiadna správa o jeho smrti nevyšla. Azda bude tento skromný príspevok aspoň malou splátkou dlžoby, ktorú voči nemu máme.

Ján Čaplovič

LITERATÚRA

1. Jaeger F. M.: *Collect. Czechoslov. Chem. Commun.* 2, 330 (1930).
2. Tesařík B.: *Chem. Listy* 101, 610 (2007).
3. Jindra J.: *Chem. Listy* 106, 51 (2012).
4. Jaeger F. M.: *Chem. Weekblad* 39, 454 (1942).
5. Heyrovský J.: *Collect. Czechoslov. Chem. Commun.* 12, 1 (1947).
6. Druce G.: *Nature* 152, 69 (1943).
7. Jorissen W. P.: *Chem. Weekblad* 43, 67 (1947).
8. Zuithoff A. J.: *Chem. Weekblad* 43, 69 (1947).

Vzpomínáme průkopníka genomiky Fredericka Sangera, nositele dvou Nobelových cen za chemii

Frederick Sanger se narodil 13. 8. 1918 a zemřel 19. 11. 2013 ve svých 95 letech. Sanger studoval v anglické Cambridge, kde v r. 1938 se stal „major in biochemistry“ a kde později dokončil i svá doktorská studia. Nejprve se úspěšně věnoval studiu struktury peptidů a bílkovin, které vyvrcholilo stanovením primární struktury insulinu. Stanovil sekvenci všech 51 aminokyselin a zahájil tím éru stanovování primární struktury nejrozličnějších bílkovin v padesátých a šedesátých letech. Všem chemikům je dobře známa jeho metoda stanovení N-koncové aminokyseliny pomocí 2,4-dinitrofenylderivátu peptidu. Tato průkopnická práce byla oceněna Nobelovou cenou v r. 1958, kdy bylo Sangerovi 40 let.

Sanger pak obrátil svou pozornost na studium metod sekvenování DNA. Při svém studijním pobytu v dánské Carlsbergské laboratoři v r. 1965 jsem měl možnost se s Fredem Sangrem setkat a vyslechnout si jeho přednášku o jeho dosavadních výsledcích ve vývoji metod sekvenace DNA. První verzi použitelné sekvenační metody DNA navrhl již v r. 1975, dva roky před konkurenční metodou Waltera Gilberta a spol. Jeho metoda využívající DNA-polymerasy I (z *E. coli*) k vytvoření komplementárních kopií sekvenované jednovláčkové DNA byla dovedena k dokonalosti v sedmdesátých letech, později byla automatizována a v podstatě umožnila spuštění projektu lidského genomu. Za tyto průkopnické práce v úsilí o sekvenaci DNA získal Sanger v r. 1980 druhou Nobelovu cenu za chemii. Tuto druhou cenu získal společně s Američany Walterem Gilbertem a Paulem Bergem.

Sanger získal řadu dalších ocenění, z nichž bych rád jmenoval: „Fellow of the Royal Society“ (1954), „Commander of the Order of the British Empire“ (1963) a „Member of the Order of Merit“ (1986). Nehynoucí poctou pro Freda Sangera je však jistě „jeho“ Sanger Institute (později Centre), který intenzivně pokračuje v jím započatém díle rozvoji genomiky.

V r. 1992 dvě britské instituce „Wellcome Trust“ a UK Medical Research Council se rozhodly založit výzkumné centrum, které by mapovalo, sekvenovalo a dekodovalo lidský genom a genomy ostatních organismů. Ustavení tohoto centra napomohlo i rozhodnutí Evropské molekularně biologické laboratoře (EMBL) umístit ve Velké Británii Evropský bioinformační institut (EBI). Bylo rozhodnuto, že nové genomické výzkumné centrum ponese Sangerovo jméno a bude lokalizováno v malé vesničce Hinxton asi devět mil na jih od anglické Cambridge. Fred Sanger oficiálně otevřel „Sanger Centre“ 4. října 1993, tedy zhruba před dvaceti lety.

Hlavní cílem Sangerova centra je zabývat se významem genomiky pro zdraví a nemoc, objasňovat podstatu genetických a infekčních nemocí, navrhovat jejich diagnostiku, možnosti léčby a prevence.

Sanger Centre po jeho otevření zaměstnával asi 50 lidí, dnes zde pracuje asi 900 lidí a v přilehlém Evropském bioinformačním centru kolem 300 lidí. Centrum se významně podílelo na projektu lidského i myšičího genomu. Genomický výzkum je samozřejmě závislý na sofistikované výpočetní technice, která rovněž zajišťuje prezentaci dostupných dat a jejich zpřístupnění ostatním vědeckým pracovníkům. Sanger Institute, spolu s kolegy z dalších institucí vytvořil plejádu asi 18 databází (viz <http://www.sanger.ac.uk/resources/databases>).

Široký vědecký program probíhá v 33 pracovních skupinách, jejichž náplň zde nebudu popisovat. Přes tuto ohromnou vědeckou kapacitu je třeba zdůraznit širokou spolupráci s dalšími institucemi. Uvádí se, že přes 90 % vědeckých publikací zahrnuje spolupráci s dalšími organizacemi. Současně probíhá více než 100 projektů sekvenace DNA patogenů. Ústav je schopen realizovat denně sekvenaci 10 bilionů basí a ročně produkuje cca 280 původních vědeckých prací.

Sanger Centre je také významným školicím pracovištěm. Mimo jiné realizuje 4letý PhD program, při němž studenti jsou registrováni na University of Cambridge. Centrum věnuje velkou pozornost komunikaci s veřejností. Ročně jej navštíví více než 1500 studentů, učitelů a skupin veřejnosti. Návštěvníci se setkávají s vědeckými pracovníky, mají možnost navštívit laboratoře a zúčastnit se nejrušnějších diskusí (zejména o etických problémech) a dalších aktivit. Jsou pořádány videokonference, kurzy pro učitele. Pro veřejnost byla vytvořena informační webová stránka www.yourgenome.org, která má pomoci porozumět genetice a genomice a pochopit jejich význam pro společnost. Je také zdrojem informací pro učitele středních škol.

Jan Káš

Čeští polarografisté – ročník 1924

V letošním roce to bude již 90 let od narození druhé (poválečné) generace fyzikálních chemiků – žáků profesorů Jaroslava Heyrovského a Rudolfa Brdičky, kteří se ve svých disertacích věnovali polarografii. Kvůli uzavření českých vysokých škol za 2. světové války všichni posléze jmenovaní ztratili jeden či dva roky, než mohli studovat na univerzitě v Praze. Kteří to byli?

Podle konkrétního dne narození je nejstarším Jiří Říha, který svou disertací „Nová metoda k derivaci polarografických křivek“ obhájil ve školním roce 1949/50. Po dostudování se stal zaměstnancem Ústředního ústavu polarografického (ÚÚP), který vedl profesor Heyrovský. V Polarografickém ústavu ČSAV (PÚ), nástupci ÚÚP a jeho pokračovateli Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV se věnoval z počátku jen polarografii, později i dalším oborům elektrochemie. Je dosud duševně čilý a úměrně svému věku i v dobré fyzické kondici.

Dalším byl Jiří Mašek s disertací „Studium diskontinuity na polarografických křivkách při redukci dusičnanů a dusitanů“. Obhájena byla ve školním roce 1950/51. Stejně jako J. Říha byl po studiích pracovníkem ÚÚP a následných ústavů. Polarografii se věnoval celý život, který mu skončil v roce 1994.

Miroslav Křivánek vypracoval disertaci „Polarografický výzkum komplexů železa se sacharosou“. Po ukončení studií polarografii opustil a zabýval se různými fyzikálně-chemickými problémy v Ústavu fyzikální chemie (ÚFCH) ČSAV a jeho pokračovatelích včetně ÚFCH AV ČR. Zemřel před několika roky.

Jaroslav Kůta, jeden z nejbližších spolupracovníků Heyrovského, obhájil ve školním roce 1949/50 práci „Přepětí vodíku na rtuťové elektrodě o konstantní době kapky“. Spolu se svým učitelem Heyrovským, v jehož ústavu pracoval až do své předčasné smrti v roce 1981, napsal monumentální monografii „Základy polarografie“, která vyšla roku 1962.

Otto Grubner v disertaci polarograficky zkoumal cystin a cystein. Podobně jako M. Křivánek pracoval v Brdičkově ÚFCH na jiných problémech než polarografických. V roce 1968 emigroval a v cizině v polovině 70. let zemřel.

Jiří Vogel napsal disertaci „Nové metody impulsové polarografie“, kterou obhájil roku 1952. Polarografii zůstal v PÚ věrný až do své předčasné smrti v roce 1973.

Miroslav Březina ve své disertaci studoval polarografii cyklopentanonu a cyklohexanonu, tu obhájil v roce 1951. Stal se jedním ze čtyř prvních vědeckých pracovníků ÚÚP. Polarografií organických sloučenin se zabýval celá 50. léta, od 60. let již méně, v PÚ a v ÚFCH JH se angažoval v jiných elektrochemických oblastech. Smrt ho zastihla v jeho 75 letech.

Na Hod boží vánoční 1924 se michelskému mlynáři narodil syn Josef, který o 27 let později obhájil disertaci „Automatické kontroly čistoty vodíku pro provoz v průmyslu“. Josef Peizker, autor disertace, se stal zaměstnancem ÚÚP a věnoval se laboratorní přístrojové technice a v pozdějších letech v ÚFCH JH i dalším elektrochemickým otázkám. Dožil se 87 let.

Referenty, tedy posuzovateli uvedených disertací, byli vždy profesori Heyrovský a Brdička. Většinou první z dvojice byl iniciátorem tématu disertace, profesor Heyrovský to byl v 5 případech, u zbývajících profesor Brdička, jemuž jednou sekundoval docent Kalousek. Z osmičky původních polarografistů zůstalo u polarografie nebo elektrochemie po celou dobu jejich vědecké kariéry šest uvedených vědců. I se zbývajícimi dvěma tvoří nedílnou součást české fyzikální chemie 20. století.

*Jiří Jindra
Kabinet dějin vědy ÚSD AV ČR*

Zprávy

*Tisková zpráva
25.10.2013, VŠCHT Praha*

Odhalení busty prof. Otty Wichterleho na VŠCHT Praha

Na VŠCHT Praha byla dne 25. října 2013 při příležitosti 100. výročí narození prof. Otty Wichterleho odhalena jeho busta. Škola tímto způsobem vzdala poctu jedné z největších osobností české vědy 20. století. Otto Wichterle se celý život věnoval chemii a dlouhá léta na této vysoké škole působil. Za své hlavní poslání v životě vždycky považoval práci chemika, byl vlastně zakladatel makromolekulární chemie u nás, ale celý svět ho zná jako vynálezce kontaktních čoček, které vynalezl a vyrobil doma v podstatě primitivních podmínkách.

Při malé ceremonii za účasti manželky profesora Wichterleho MUDr. Lindy Wichterlové a syna prof. Kamila Wichterleho, zástupců Akademie věd ČR i starostky městské části Praha 6 Marie Kousalíkové zavzpomínal na tuto osobnost české i světové chemie prof. Rudolf Zahradník, bývalý předseda AV ČR.

Busta je dílem sochaře Milana Váchy, který je autorem řady sochařských objektů u nás i v zahraničí. Po prof. Ottu Wichterlovi byla při příležitosti odhalení jeho busty pojmenována také moderně zrekonstruovaná velká posluchárna na VŠCHT Praha.



Projekt INOB ve finiši

I když rok 2014 právě začíná, některé aktivity míří ke svému cíli. Týká se to i OP VK projektu „Inovace předmětů biochemie a klinické biochemie v rámci spektra oborů lékařské fakulty a fakulty zdravotnických věd směrem k lepšímu uplatnění absolventů v oblasti vědy, výzkumu i praxe“, reg. č. CZ.1.07/2.2.00/15.0293, který byl řešen na Ústavu lékařské chemie a biochemie Lékařské fakulty Univerzity Palackého v Olomouci v posledních třech letech.

Nosnou ideou projektu byla inovace výuky biochemie a klinické biochemie tak, aby studenti získávali aktuální informace z moderních zdrojů, nejen z učebních textů, ale také přímo z praxe, ať již nemocničního provozu nebo výzkumných aktivit. Projekt byl zaměřen na studenty Lékařské fakulty (LF) a Fakulty zdravotnických věd (FZV) Univerzity Palackého převážně v předmětech Biochemie a Klinická biochemie, dále také ve vybraných volitelných předmětech.

Důležitými partnery projektu byla Fakultní nemocnice Olomouc, Středomoravská nemocniční, a.s. a Střední zdravotnická škola a Vyšší odborná škola zdravotnická Emanuela Pöttinga Olomouc.

Hlavní náplní projektu byla inovace obsahu přednášek, praktických cvičení a seminářů o aktuální poznatky a metodiky z oblasti biomedicínských věd. Součástí modernizované výuky se staly nově vytvořené e-learningové moduly, s podporou projektu probíhaly přednášky zahraničních odborníků a specialistů z praxe. V rámci zvýšení motivace zájemců o studium byl připravován Den vědy jako součást Dne otevřených dveří na LF a FZV, se stejným cílem byly pořádány prezentace na Střední zdravotnické škole a Vyšší odborné škole zdravotnické Emanuela Pöttinga Olomouc.

Modernizace výuky probíhala formou začlenění nových poznatků do přednášek, úpravou designu prezentací, větším propojením se semináři a praktickými cvičeními. V rámci seminářů a praktické výuky došlo k zavedení nových úloh a aktuálních témat, která byla detailně rozebírána. Byly vytvořeny videozáznamy základních i pokročilých technik práce v biochemických laboratořích, které studentům byly následně k dispozici i na webových stránkách projektu. E-learningová podpora zahrnovala vedle prezentace probraného učiva i interaktivní procvičovací a prověřovací testy, již zmíněné videozáznamy, vybrané kazuistiky. Jako další výstupy projektu lze zmínit studijní opory, vydané formou skript.

Ve svých hodnoceních studenti reagovali převážně kladně, aktivita na straně vyučujících se odrazila i na vyšší aktivitě studentů na přednáškách a hlavně v praktických cvičeních. Za přínosné považovali studenti prezentace zvaných zahraničních expertů, nejvíce oceňovali přednášky tuzemských odborníků z praxe. Z pohledu splnění požadavků kladených na projekt je podstatným parametrem počet projektem podpořených osob, v žádosti deklarovaný počet 1290 studentů se nakonec ustálil na čísle 1417.

Z našeho subjektivního pohledu lze konstatovat, že projekt pomohl studentům k lepší orientaci v dnes již dosti



složitě oblasti biochemie a biomedicínských věd, umožnil jim ucelenější obraz a lepší pochopení zákonitostí biochemických pochodů v lidském organismu, což se projevilo i v lepších studijních výsledcích u zkoušek. Věříme, že projekt pomůže také k správnému chápání konsekvencí v klinické diagnostice, která hojně využívá biochemických parametrů. U části studentů pak důraz na zařazování aktuálních poznatků z biomedicínských věd mohl vyvolat zvýšený zájem věnovat se této problematice i po ukončení svého pregraduálního studia v rámci své další profesní profílace. Více o projektu lze nalézt na webových stránkách projektu: www.inob.upol.cz.

Materiály připravené za pomoci projektu a výstupy projektu budou na našem ústavu využívány i nadále, stejně tak jako bude probíhat zařazování aktuálních témat do výuky uskutečňované na našem pracovišti.

Závěrem bilancování patří poděkování všem členům řešitelského kolektivu a partnerům projektu, bez jejichž entuziasmu a vzájemné vstřícnosti by řešení projektu probíhalo obtížně.

*Pavel Kosina,
koordinátor projektu*

*Tisková zpráva
Neratovice, 15. 10. 2013*

Spolana má nového generálního ředitele

Karel Pavlíček vystřídal Ivana Olivu na pozici generálního ředitele a také místopředsedy představenstva společnosti Spolana.

Karel Pavlíček je zkušeným manažerem s mnohaletými znalostmi v oblasti strategie trhu a rozvoje produktů v regionu střední a východní Evropy, Rusku a Turecku. Absolvoval Vysokou školu báňskou – Technickou univerzitu v Ostravě, fakultu strojírenství, dokončil studia MBA na britské Henley Management College v oboru mezinárodní konsorcia.

Karel Pavlíček hovoří plyně anglicky a polsky. Mezi

jeho obecné zájmy patří strategické řízení, procesní řízení, rozvoj podnikání a IT.

Ivan Oliva bude ve své profesní kariéře pokračovat v rámci skupiny Orlen a to prací pro skupinu Unipetrol.

Složení představenstva Spolany s účinností od 15. října 2013:

Karel Pavlíček, místopředseda představenstva
Krzysztof Dzuba, předseda představenstva
Jarosław Ptaszyński, místopředseda představenstva
Artur Sławomir Jabłoński, člen představenstva

SPOLANA a.s. je jednou z největších chemických společností v České republice a jediným českým výrobcem PVC a kaprolaktamu. Produkuje také hydroxid sodný a síran amonný. Zaměstnává více než 700 lidí. Od roku 2006 je Spolana vlastněna polskou chemickou společností ANWIL. ANWIL i UNIPETROL jsou členy skupiny ORLEN.

Došlo do redakce

1. listopadu 2013 bylo dosaženo hranice **75 milionů „malých molekul“** – organických a anorganických chemikálií, které dostaly registrační číslo CAS (nemluvě o 65 mil. sekvencích). Rychlost výskytu nových chemických látek se nesnižuje. Gratuluji všem lidem, kteří pamatují společně s námi překročení sedmého či osmého milionu látek v osmdesátých letech minulého století a ještě stále jsou aktivní a zajímají se o rešerše. Tehdy bylo překročení každého milionu látek významnou událostí, dnes je tempo takové, že se zdůrazňují jen „jubilejní“ hodnoty.

Ke dni 17. prosince 2013 budou z nabídky sítě STN International vyřazeny čtyři databáze: CHEMINFORMRX, DETHERM, CHEMSAFE a SPECINFO. Využití těchto databází v našich zemích bylo velmi nízké a k dispozici jsou náhradní prameny – jak v síti STN (ReaxysFile, CASREACT, CAS Registry, MSDS aj.), tak i v jiných zdrojích.

Jaroslav Horký

Chemik na cestách



Dva týdny prázdnin

Cesta na Mezinárodní chemickou olympiádu (IChO) je snem snad všech účastníků české Chemické olympiády (ChO). Je nelehké se do reprezentačního týmu dostat, protože adepti musí projít sérií tří kol olympiády, která začínají na jejich školách a pokračují přes kraj až do celonárodního setkání vybraných chemiků ze všech koutů republiky, kteří se zde utkají jak na poli teoretickém, tak i v praktické zkoušce. Šestnáct nejúspěšnějších potom pokračuje do prvního vý-

běrového soustředění na IChO. Z toho vzejde osm konkurentů, kteří dále změří své síly a zručnost v praktickém soustředění, jehož čtyři nejlepší zúčastnění utvoří reprezentační tým.

Letošní reprezentační tým byl tvořen dvěma již z minulého roku zkušenými reprezentanty z Jihomoravského kraje: Kamilem Maršálkem a Romanem Beránkem. Do čtyř je doplnili dva nováčci Adam Páda z Ostrova nad Ohří a moje maličkost. Na 45. IChO konající se v ruské Moskvě jsme odletěli v skoro plné sestavě nás čtyř a našeho mentora, Petra Holzhausera z VŠCHT Praha. Druhý doprovodný člen týmu, Michal Kolář z ÚOCHB AV ČR,



Foto (zleva): Roman Beránek, Karel Lichtenberg, Kryštof Březina, Náša, Petr Holzhauser, Kamil Maršálek, Adam Přáda

se odletu v řádném termínu z důvodu nemoci nezúčastnil a tým doprovodil až později v průběhu soutěže.

Letadlo Českých aerolinií na letišti Šeremetěvo odlétalo z Prahy na konci července. První věcí, která náš šokovala, bylo všudypřítomné zpoždění, které ovlivňovalo všechno dění. Velkým dílem bylo způsobováno příšernou dopravní situací ve městě a také tím, že veškerá časová náročnost na přesuny daná v programu byla silně podhodnocená.

Na uvítací ceremonii byly představeny všechny týmy a shlédli jsme několik působivých kulturních vložek, které celý program doplňovaly a nabízely nám drobné ochutnávky tradičního ruského umění. Toho dne jsme také poznali naši guidku, Nášu, která studovala na místní univerzitě slovanské jazyky, zejména češtinu a srbštinu. Nebylo tedy těžké si s ní porozumět, i když někdy přecházela pro usnadnění komunikace do angličtiny. Byla pro nás nezbyt-

nou spojkou mezi ruskou a českou kulturou a také příjemnou průvodkyní pro volnočasové chvíle.

Program soutěže byl proložen projížďkami po Moskvě a prohlídkami jejích památek. Město uchvátilo svou rozlehlostí, opulentností, ale i sociálními rozdíly mezi jednotlivými čtvrtěmi. Tu vysoké mrakodrapy a bankovní čtvrti rozvíjející se závratným tempem a tam zas ohavné paneláky se sloupanou fasádou a dřevěnými dveřmi, které téměř budily lítost svou sešlostí. Za náš pobyt v Moskvě jsme viděli všechny její důležité pamětihodnosti, kromě Leninova mauzolea, ve kterém však prý, podle naší guidky, není nic moc zajímavého kromě podivně vzhlízející mrtvolky.

Soutěž samotná byla rozdělena do dvou tradičních částí – praktické zkoušky a teoretického testu. V praxi jsme se věnovali třem soutěžním úlohám. První spočívala v izolační přípravě hydrazonů dvou substituovaných benzaldehydů a jejich identifikaci, přičemž byl bodovaným kritériem výtěžek. To byl trochu problém, jelikož produkt se nedal v časových podmínkách vyměřených pro zkoušku vysušit a výtěžky byly bez výjimky nadstoprocentní. Další úlohou bylo stanovení kritérií pro bazénovou vodu, například tvrdosti, či kyselosti. Třetí a poslední úlohou bylo viskozimetrické stanovení molární hmotnosti polyethylenglykolu. Tato úloha byla extrémně náročná na čas a nikdo z nás ji nestihl. Vlastně ji nestihl skoro vůbec nikdo. Teoretická zkouška se nesla v podobně nestihnutelem duchu. Šlo o osm úloh ze všech oblastí chemie, všeobecně vzato dost náročných a komplikovaných. Byl zázrak, když jsme se posledního dne na závěrečné slavnosti dozvěděli, že se náš tým stal držitelem tří stříbrných a jedné bronzové medaile a s relativně klidným svědomím jsme z Moskvy odletěli zpět do malé, ale útulné České republiky. Nyní jen zbývá doufat, že se mně a Adamovi povede znovu se do reprezentace probojovat, a že další rok na 46. IChO ve vietnamské Hanoi zabodujeme ještě lépe.

Kryštof Březina

Osobní zprávy



Památce Ing. Jiřího Hetflejše, DrSc.

Dne 11. listopadu tohoto roku zemřel ve věku 77 let dlouholetý člen našeho redakčního kruhu Ing. Jiří Hetflejš, DrSc. Vzpomínám, že někdy v průběhu 80. let minulého století jsem zašel na Ústav teoretických základů chemické techniky (nyní Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.), abych pana doktora požádal o pomoc s hydrogenací jistých polymerů (tu pomoc jsem skutečně dostal). Vzhlížel jsem k němu s velikou úctou netuše, že o desetiletí později budu mít tu čest s tímto významným chemikem opakovaně spo-

lupracovat postupně na několika grantových projektech, a že se také setkáme jako redaktoři v časopise Chemické listy. Naše spolupráce byla pro mě nejen velmi přínosná odborně, ale i příjemná, protože JH vždy jednal se svými kolegy laskavě a se skromností.

Uvedu nyní některé důležitější údaje z jeho odborného životopisu, tak jak se mi je podařilo získat od jeho kolegů. V letech 1956 až 1961 vystudoval VŠCHT v Pardubicích, obor Technologie plastických hmot. V roce své promoce nastoupil do aspirantury na Ústav teoretických základů chemické techniky ČSAV (nyní Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.) k Dr. Ing. Chvalovskému, DrSc., a tomuto ústavu zůstal věren do konce života. Svou kandidátskou práci obhájil v r. 1964, doktorskou disertační práci (s názvem „Adiční reakce katalysovaná komplexy

přechodných kovů“) pak v r. 1980. V letech 1966–7 působil jako Research Associate na MIT v Bostonu u prof. D. Seyfertha. Roku 1969 se stal na ÚTZCHT vedoucím výzkumné skupiny, později vedl po Dr. Chvalovském skupinu Homogenní katalýza, v letech 1986–90 byl zástupcem ředitele pro vědeckovýzkumnou činnost. Od r. 1993 do r. 1996 byl vedoucím oddělení Biotechnologie a základů procesů pro životní prostředí. V květnu 1998 odešel do důchodu, ale dlouho pak ještě na ÚCHP působil a podílel se na publikování. Pravidelně docházel do ústavu popovídat si s kolegy a poskytnout cenné rady. Během své odborné kariéry vychoval osm aspirantů, je autorem či spoluautorem 122 původních prací, 5 přehledných referátů, 5 monografií, 117 patentů a velkého počtu výzkumných zpráv a příspěvků na mezinárodních konferencích. Patřil u nás k uznávaným autoritám v oboru homogenní katalýzy a organokřemičité chemie. Byl aktivní i jako redaktor: několik let pracoval pro Coll. Czech. Chem. Commun., později pro náš časopis. Vzpomínám, že se vedle svých běžných redaktorských povinností ochotně ujal nevděčné práce, totiž podrobných revízi již vyšlých čísel a během pravidelných porad nám pak sděloval, kde příslušný redaktor přehlédl tu či onu chybu. Dále působil jako překladatel a korektor anglických textů (překládal i do angličtiny), čemuž se celoživotně věnoval, a to nejen na svém ústavu, ale i v době, kdy působil jako redaktor v CCCC. Také se účastnil pořádání několika mezinárodních konferencí, ať již jako pořadatel či spolupředatel. Co se týká soukromí, jeho koníčky bylo lepení modelů letadel a lodí (tzv. kity) a sbírání poštovních známek se zaměřením na první republiku. V mládí hrál v kapele, ale později už jen doma na piano.

Pana doktora budeme v redakci velice postrádat – jeho práci, jeho humor, jeho osobnost.

Jiří Podešva

Odešel Ing. Miroslav Janík, CSc.

V pátek 4. října 2013 odešel v nedožitých 88 letech Ing. Miroslav Janík, CSc., zakladatel a dlouholetý pracovník Výzkumného ústavu pro koksochemii Urxových závodů (dnes výzkumný odbor a.s. DEZA) ve Valašském Meziříčí.

Nesnadno se píše vzpomínka na blízkého přítele a kolegu, který mne jako čerstvého průmyslováka v roce 1959 přijímal do tehdejšího VÚKCh Urxových závodů v Ostravě, a se kterým jsem spolupracoval až do jeho posledních dnů. Byl to můj odborný otec, který mne v roce 1963 doporučil k dálkovému studiu VŠCHT, byl oponentem mé disertační práce v roce 1972 a oponentem práce habilitační v roce 1994.

Ing. Janík byl nestorem československé i české dehtochemie. Ve své odbornosti se zaměřoval na optimalizaci výroby sazí, oblast fenolů, zpracování a využití černouhelné smoly a na studium vzniku dehtu. Výsledky svých prací publikoval v řadě tuzemských i zahraničních odborných časopisů, patentových přihlášek, přednášek, vysokoškolských

skript a řady dalších publikací. Jako uznávaný expert v dehtochemii působil na katedře koksárenství a plynárenství VŠCHT v Praze i na katedře koksárenství VŠB v Ostravě. Jak jeho spolupracovníci ve firmě, tak studenti a pedagogičtí kolegové, oceňovali především jeho chápající a citlivý lidský přístup, zásadovost, čestnost, kolegiální a pracovitost.

Ani v důchodu se Ing. Janík nevěnoval odpočinku. Spolupracoval dále s vysokými školami jako konzultant a oponent, věnoval se historickým tématům v rámci ČSPCH a spolupracoval i s Valašským muzeem v Rožnově pod Radhoštěm. Z dalších zálib se věnoval fotografii, dobré hudbě a výtvarnému umění a samozřejmě i svým vnukům a pravnukům.

Jeho úmrtím odchází z řad českých chemiků osobnost, která představovala spojení odbornosti, kulturních zájmů i vzácných lidských vlastností. Byl autoritou pro své kolegy i studenty, milovaným manželem a otcem dvou synů. Radě z nás, zejména těch starších, bude chybět po celou dobu života, která je nám ještě vyměřena.

Jan Vymětal

Poslední ohlédnutí za profesorem Dunschem

Dne 29. listopadu 2013 zemřel známý německý elektrochemik, Prof. Dr. Lothar Dunsch. S jeho odchodem jsme ztratili vzácného člověka a všestranně vzdělaného vědce, který měl silné vazby i na českou chemickou komunitu. Lothar Dunsch se narodil 14. února 1948. Vystudoval chemii na Technické univerzitě ve Freibergu (Bergakademie Freiberg). Značnou část své odborné kariéry strávil na Leibnizově ústavu pevných látek a materiálů (Leibniz Institut für Festkörper und Werkstofforschung, IFW), který vznikl v roce 1992 transformací ústavu Akademie věd NDR (Zentralinstitut für Festkörperphysik und Werkstofforschung) v Drážďanech. Na tomto pracovišti působil Lothar Dunsch od jeho založení až do své smrti. Vybudoval zde oddělení elektrochemie a vodivých polymerů, které se v průběhu následujících dvou dekád stalo světově uznávaným standardem ve výzkumu vodivých polymerů a uhlíkových nanostruktur, zejména fullerenu a endohedrálních fullerenu.

Prof. Dunsch se této tématice věnoval s příslovečnou německou důkladností od syntézy až po fyzikálně chemickou charakteristiku získaných látek. Přitom používal hlavně metody elektrochemické a spektroskopické (UV-Vis-NIR, IR, Raman, EPR a NMR). Oba tyto základní experimentální přístupy tvůrčím způsobem zkombinoval ve formě *in-situ* spektroelektrochemie, což byla hlavní oblast činnosti jeho týmu v posledních letech. Za tím účelem založil v IFW Spektroelektrochemické centrum (Zentrum für Spektroelektrochemie). Navenek se aktivita Spektroelektrochemického centra projevila zejména dvěma letními školami spektroelektrochemie, které se uskutečnily v letech 2011 a 2013 v Drážďanech. Pro tyto letní školy získal Lothar Dunsch nejen kvalitní přednášející, ale zorganizoval i oblíbená praktika, při kterých mohli účastníci konfe-

rence sami provádět spektroelektrochemické experimenty. Na poslední letní škole, která se konala koncem srpna 2013, byl Lothar Dunsch bohužel již zjevně indisponován svým dlouhým bojem se zákeřnou nemocí. Přesto zde ještě dokázal odprezentovat hodinovou přednášku a věnovat se organizaci programu s plným nasazením a aktivitou, tak jak byl celý život zvyklý. Z četných dalších vědeckých setkání s touto tematikou stojí za zmínku konference Spectroelectrochemistry 2012, kterou jsme spolu zorganizovali jakožto satelitní akci 63. výroční konference Mezinárodní elektrochemické společnosti (ISE) v Praze. Všechna tato odborná setkání byla významně podpořena českými elektrochemiky, avšak většina z nás si zřejmě hlavně vybaví oblíbenou sérii elektrochemických seminářů Praha-Drážďany. Tyto semináře se konaly střídavě na české a německé straně hranic: Oybin 2011, Červený Hrádek 2009, Freital 2007, Roztoky u Křivokláta 2005, Cunewalde 2003, Jetřichovice 2001, Holzgau 1999, Praha 1998, Krippen, 1997.

Prezentování výsledků na výše zmíněných konferencích vždy nutně předcházela adekvátní práce v laboratoři a také v tomto ohledu můžeme vzpomenout, že řada českých a slovenských elektrochemiků strávila ve skupině Lothara Dunsche na IFW hodně plodného času. Nebudu uvádět žádná jména, abych na někoho nezapomněl. Díky Lotharovi jsme se zde mohli seznámit s unikátními materiály (vodivé polymery, fullereny, uhlíkové nanotrubic) a moderními experimentálními technikami (Raman, EPR, NMR, AFM, STM) samozřejmě vždy více či méně propojenými s elektrochemií. Získali jsme tak nové poznatky a zkušenosti, které jsme mohli dále rozvíjet i na našich domácích pracovištích – velmi často ale v další těsné spolupráci s Lotharem a jeho skupinou. Spontánní spolupráce českých a německých kolegů byla usnadněna nejen snadnou dopravní dostupností mezi Prahou a Drážďanami, ale hlavně tím, že elektrochemici na obou stranách hranic k sobě měli vždy blízko – odborně i lidsky, a to i včetně toho, že na obou stranách čelili podobným překážkám v dobách, kdy ještě byla tato hranice bedlivě strážena.

Lothar Dunsch navštívil Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského v Praze poprvé v roce 1987 a dále zde působil v letech 1988–89. Společně s Janem Weberem a Pavlem Jandou jsme se tehdy zabývali elektrodami ze skelného uhlíku a tenkými filmy fluoropolymerů typu Nafion. V roce 2000 jsme na IFW vypracovali ještě s Peterem Raptou (nyní profesorem na STU v Bratislavě) první Vis-NIR a Ramanovu spektroelektrochemickou studii uhlíko-

vých nanotrubic, která se následně ukázala jako průkopnická i v globálním měřítku. Následovalo dalších více než 50 společných publikací v časopisech a přes 10 kapitol v monografiích o spektroelektrochemii uhlíkových nanostruktur. Zřejmě důležitější než objem společného díla je fakt, že byl tak položen základ pro další rozvoj spektroelektrochemie uhlíkových nanostruktur, který víceméně věrně kopíroval převratné objevy na tomto poli v uplynulých letech, tj. od fullerenů, nanotrubic, fullerennových lusků až ke grafenu, jenž je nepochybně klíčovou tématikou současnosti.

Vědecký přínos Lothara Dunsche byl několikrát oceněn vědeckou komunitou, např. medailí Jiřího Agricoly (1974), Leibnizovou medailí (1986) a rovněž Heyrovského medailí, která mu byla udělena Československou akademií věd v roce 1990. Habilitoval se na Technické universitě v Drážďanech (docent 1997, profesor 2002). Lothar Dunsch byl v roce 2012 pozván k pronesení prestižního cyklu přednášek Heyrovský-Ilkovič-Nernst Lecture, a v témže roce mu vědecká rada Slovenské technické university v Bratislavě udělila titul doctor honoris causa.

Lothar Dunsch byl nejen uznávaný vědec, ale i přirozená autorita pro své spolupracovníky. Ta vyplývala nejen z jeho rozsáhlých znalostí, jež sahaly od chemie až po historii, ale i z přátelského, avšak zároveň i odborně náročného prostředí, které dokázal vytvořit ve své skupině. V jeho pracovně na IFW se často svítilo i v pozdních nočních hodinách, včetně sobot, nedělí a svátků. Tento jeho entuziasmus spontánně převzala i většina jeho spolupracovníků – samozřejmě, aniž by je k tomu Lothar nějak nutil, nebo je při práci přehnaně kontroloval. Nicméně, ne vždy se v jeho skupině jen asketicky bávalo, našel se čas i na společné výlety a posezení u piva či jiných příjemných nápojů. Zábavné i motivující byly v IFW také každodenní přestávky na svačinu, při kterých se s Lotharem vždy scházel celý tým včetně studentů a stážistů. Samozřejmě, řeč se při těchto akcích prakticky vždy nakonec stočila na spektroelektrochemii a podobná témata.

Bohužel toto vše už je minulostí. Utěšovat se můžeme pouze tím, že dílo, které Lothar Dunsch založil, bude dále žít v pracích jeho žáků, kolegů a přátel. Jeho odkaz bude jistě povzbuzovat a inspirovat také další chemiky, zabývající se problémy elektrochemie, spektroelektrochemie, fullereny, vodivými polymery a dalšími tématy, kterým se Lothar věnoval.

Ladislav Kavan

 Výročí a jubilea

Jubilanti ve 2. čtvrtletí 2014**90 let**

Prof. Ing. Jaroslav Janák, DrSc., (27.5.), ÚIACH
AV ČR Brno

Ing. Vladimír Pokorný, (7.6.), VÚMCH Brno

85 let

Ing. Radko Komers, CSc., (11.4.), ÚCHP AV ČR Praha

Ing. Radomil Adámek, (9.5.), VCHZ Synthesia Pardubice-
Semtín

Doc. RNDr. Libuše Kišová, CSc., (29.6.), PšF MU Brno

80 let

Ing. Jindra Čapková, (20.5.), VŠCHT Praha

RNDr. Jarmila Prášilová, CSc., (24.5.), FJFI ČVUT
Praha

Prof. Ing. Jan Káš, DrSc., (26.5.), VŠCHT Praha

Doc. RNDr. František Kašpárek, CSc., (10.6.), PšF UP
Olomouc

Ing. Zdeněk Urner, (10.6.), VŠCHT Praha

Ing. František Barkman, (15.6.), Spolana Neratovice

75 let

Prof. RNDr. Jiří Patočka, DrSc., (24.4.), Univerzita
obran Hradec Králové

Prof. RNDr. Jan Schraml, DrSc., (13.5.), ÚCHP AV ČR
Praha

Ing. Igor Janovský, Ph.D., (3.6.), Národní technické
muzeum Praha

Prof. RNDr. Pavol Hrdlovič, DrSc., (28.6.), SAV
Bratislava

70 let

Prof. Ing. Pavel Jandera, DrSc., (1.4.), Univerzita
Pardubice

Ing. Karel Michal Celba, CSc., (16.4.), Praha

Ing. Miloslav Odstrčil, CSc., (4.5.), Královopolská
strojírna Brno

RNDr. Eva Juláková, CSc., (4.6.), Grantová agentura
ČR Praha

Ing. Karel Kratzer, CSc., (11.6.), SZÚ Praha

Prof. RNDr. Pavel Beneš, CSc., (13.6.), PedF UK Praha

65 let

Ing. Petr Teplý, CSc., (9.4.), Synthesia Pardubice

Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc., (16.4.), VŠCHT
Praha

Ing. Ladislav Cvak, Ph.D., (3.5.), Teva Czech Industries
Opava

RNDr. Zdeněk Svatoš, (28.5.) Česká společnost
pro jakost Praha

Doc. RNDr. Vladimír Velebný, CSc., (10.6.), CPN Dolní
Dobrouč

Ing. Petr Holý, CSc., (21.6.), ÚOCHB AV ČR Praha

60 let

Ing. Hana Dvořáková, CSc., (3.4.), VŠCHT Praha

Ing. Alena Reissová, (6.4.), Kaučuk Kralupy

Doc. RNDr. Jaroslav Sochor, CSc., (12.4.), FaF UK
Hradec Králové

Ing. Josef Vyhňálek, (15.4.), SPAK Foods s.r.o. Sušice

Doc. Ing. Radovan Bílek, CSc., (16.4.), VÚE Praha

Doc. Ing. Stanislav Kafka, CSc., (29.4.), UTB Zlín

Doc. Ing. Igor Linhart, CSc., (2.5.), VŠCHT Praha

Ing. Františka Pavlíková, CSc. MBA, (20.5.), CellmaGel
Praha

Mgr. Milan Klečka, (21.5.), ZČU Plzeň

Ing. David Šaman, CSc., (15.6.), ÚOCHB AV ČR Praha

RNDr. Petra Sázellová, CSc., (27.6.), ÚOCHB AV ČR
Praha

Ing. Jiří Reiss, CSc., (27.6.), SCHP ČR Praha

Srdečně blahopřejeme

Zemřelí členové Společnosti

Ing. Miroslav Janík, CSc., zemřel 4. října 2013 ve věku
88 let.

Ing. Jiří Heftlejš, DrSc., zemřel 11. listopadu 2013 ve
věku 77 let.

Čest jejich památce