

Československá spektroskopická společnost



Bulletin

Čs. spektroskopická spol.
při ČSAV
KNIHOVNA
Přírůstk. č. 102

18

1974

V období od 6.prosince 1973 do 30.června 1974
pořádala Čs.spektroskopická společnost při ČSAV tyto akce :

- 5.pracovní schůzi odborné skupiny Mössbauerovy spektroskopie
v Bratislavě
- 7.pracovní schůzi odborné skupiny instrumentálních radioana-
lytických metod v Praze
- 17.zasedání hlavního výboru ČSSS v Havířově
- V.čs.spektroskopickou konferenci v Havířově
- 6.pracovní schůzi odborné skupiny Mössbauerovy spektroskopie
v Kálnici
- 6.pracovní schůzi odborné skupiny spektroskopie pevného stavu
v Praze
- Konferenci o instrumentální aktivační analýze - IAA 74
v Mariánských Lázních
- 5.pracovní schůzi odborné skupiny hmotové spektrometrie
v Praze
- 2.pracovní schůzi odborné skupiny automatické spektrometrie a
12. pracovní schůzi odborné skupiny rentgenospektrální analýzy
v Ostravě
- 14.pracovní schůzi odborné skupiny lokální elektronové mikro-
analýzy v Praze
- 1.pracovní schůzi odborné skupiny magnetické rezonanční spek-
troskopie v Brně

Dne 22.dubna 1974 se konalo v hotelu Merkur v Havířově 17.zasedání hlavního výboru. Schůzi zahájil v 19 hodin dr.J.Kuba a řídil celý její průběh.

Dr.Bartusek z Domu techniky ČVTS v Ostravě referoval o přípravách na V.čs.spektroskopickou konferenci.

Dr.Moldan přednesl zprávu o činnosti PHV. Uvedl, že na zasedání Kolegia pro chemii a chem.techniku byla činnost Společnosti kladně hodnocena. K 25.výročí org.spektroskopie, které je v tomto roce, bude vydán Bulletin, dále se uvažuje o informování veřejnosti o činnosti ČSSS a o konání Colloquia Spectroscopica Internationale v ČSSR v roce 1977. Z organizačních záležitostí uvedl, že v nejbližší době budou rozeslány členské legitimace. Oznámil, že ekonomický odbor ČSAV nemá námitek proti placení příspěvků ústavu ČSAV.

Ing.Moravec zhodnotil činnost molekulové sekce. Uvažuje se o založení odborné skupiny NMR a EPR. Pro zlepšení činnosti sekce je nutné prohloubit odborné řízení skupin, kontrolovat činnost a vyžadovat uskutečnění předem schváleného plánu činnosti odborných skupin. Je nutné navrhovat plán podle zájmu členů. V rámci OS chemické spektroskopie by měly být zařazovány přednášky a instruktáže pro středně technické kádry. Uskutečnila se schůze OS Mössbauerovy spektroskopie, které se zúčastnilo 13 pracovníků.

Dr.Horák referoval o plánu práce na 2.pololetí roku 1974 a o perspektivním plánu pro celé tříleté období.

Plán byl předložen všem zúčastněným v písemné formě. Plán na rok 1975 je uveřejněn v tomto čísle Bulletinu. VŠCHT v Praze pořádá od 19. - 21.11.1974 seminář o NMR s mezinárodní účastí.

Organizační tajemník a místopředsedové zajistí podzimní zasedání hlavního výboru v Bratislavě společně s přípravou programu k 30.výročí SNP.

Dr.Rubeška referoval o plánu zahraniční spolupráce. Do konce července musí být podán návrh na pozvání zahraničních hostů. Všechny konference, na nichž se předpokládá účast alespoň jednoho zahraničního účastníka, je nutné pořádat jako národní s mezinárodní účastí.

Bude vypracován dlouhodobý plán příprav XX.C.S.I., především pak té části, která se bezprostředně týká ČSSS a v Bulletinu bude vydána zpráva o přípravách na C.S.I.

Navrhuje se posílit na XX.C.S.I. molekulovou sekci.

Dr.Rubeška byl pověřen zastupováním ČSSS při jednání s organizačním výborem XIX.C.S.I.

Na seminář emisní spektroskopie v lednu 1975, který pořádá Slovenská chemická společnost, pozve ČSSS několik zahraničních hostů.

Dr.Nová referovala o placení příspěvků a rozpočtu. Rozpočet bude upraven podle plánovaných akcí a do konce června předložen ČSAV.

Byl schválen text socialistického závazku Čs. spektroskopické společnosti, jehož návrh byl všem účastníkům předložen v písemné formě. Konečné znění, do kterého budou zahrnuty připomínky z diskuze, vypracuje dr.Mráz.

Zpráva o V.československé spektroskopické konferenci

Ve dnech 22. - 26.dubna 1974 uspořádala v Havířově Československá spektroskopická společnost při ČSAV spolu s Domem techniky ČVTS Ostrava V.československou spektroskopickou konferenci. Všechny odborné a společenské akce, trvající takřka celý týden, se konaly v prostorách hotelu Merkur, v němž byla většina účastníků i ubytována.

Konference se konala pod záštitou Městského výboru KSČ a Městského národního výboru v Havířově, Československé vědeckotechnické společnosti a ve spolupráci se zainteresovanými útvary největších závodů Ostravska, Nové huti Klementa Gottwalda, Třineckých a Vítkovických železáren. Konference se tak stala významnou odbornou a společenskou událostí v místě konání a nejvýznamnější spektroskopickou událostí roku 1974 v Československu.

Organizační výbor připravil pro účastníky této národní konference bohatý odborný program. Na dopolední hodiny byly zařazeny plenární přednášky, v nichž byly probírány možnosti a perspektivy progresivních metod, postupů a teorií. Úplné texty těchto přednášek budou vydány ve zvláštním sborníku, který vyjde v dohledné době; pro zájemce je na konci zprávy uveden přehled autorů a názvů přednesených přednášek.

V odpoledních hodinách byla na program zařazena krátká sdělení o výsledcích experimentální i teoretické činnosti autorů i autorských kolektivů. Krátkých sdělení bylo celkem 81, takže je bylo třeba rozčlenit do tematických celků a přednášet je souběžně ve čtyřech sekcích.

Konference byla zahájena v úterý dne 22.dubna 1974 v 9 hod. plenárním zasedáním; zahajovacího ceremonielu se zúčastnili zástupci organizačního výboru konference, oficiální hosté a reprezentanti spolupořadatelů. Týž den se konala společná večeře účastníků konference s programem. Středeční večer byl vyhrazen panelovým diskuzím a jednání s vystavovateli přístrojů. Ve čtvrtek v 17 hod. byla konference oficiálně uzavřena. V pátek dopoledne proběhly ještě exkurze do laboratoří ostravských podniků a do okolí města.

Konference se účastnilo celkem 335 odborníků, své výrobky vystavovalo 8 významných světových i našich firem.

Byly předneseny tyto přednášky :

R. J i r k o v s k ý , Vysoká škola báňská, Ostrava :

Úkoly spektrální analýzy v hutnictví

D. P a p o u š e k , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J.Heyrovského ČSAV, Praha :

Moderní aspekty infračervené spektroskopie vysokého rozlišení

A. Š i m ů n e k , Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha :

Výpočty rentgenových emisních pásů

H. K l o k o č n í k o v á , Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha :

Rentgenová absorpční spektra IV.vedlejší periody

J. D r a h o k o u p i l , Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha :

Vliv chemické vazby na rentgenové emisní pásy K/β_2 prvků IV.vedlejší periody

J. C z y ž , Třinecké železářny VŘSR, Třinec :

Rozbor vysokopevných a ocelářských strusek na rtg fluorescenčním spektrometru typ 72.000 firmy ARL

Z. V o k á č , Výzkumný ústav stavebních hmot, Brno :

Využití rtg analýzy v cementářském průmyslu

S. G r e g o r , L. Č e c h , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava - Kunčice :

Československé analytické normály práškových materiálů

J. J u n a , Ústřední ústav geologický, Praha, J. H o l e č k o v á , M. P e l i k á n o v á , M. V e j s , Geindustria, Černošice :

Provozní a fyzikální vlastnosti spektrometru PHILIPS PW 1450

Z. F r y n t a , Státní výzkumný ústav materiálu, Praha :

Příspěvek k rentgenové spektrální analýze polovodičovými detektory Ge (Li)

L. Č e c h , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava - Kunčice:
Použití intenzifikačních přísad při mletí vzorků práškových materiálů pro rtg spektrometrii

V. S y c h r a , J. J a n o u š k o v á , Laboratoř plamenové spektrometrie VŠCHT, Praha :

Zhodnocení bezplamenových technik atomizace v atomové absorpční a atomové fluorescenční spektrometrii

I. R u b e š k a , Ústřední ústav geologický, Praha :

Dlouhocepné trubice v absorpční plamenové spektrometrii

D. K o l i h o v á , N. D u d o v á , Laboratoř plamenové spektrometrie VŠCHT, Praha :

Bezdisperzní systémy v atomové fluorescenční spektrometrii

B. P o l e j , M. H e j t m á n e k , VŠCHT, Praha :

Účinnost lamp s dutou katodou

V. S t r e š k o , M. J a r o š , Geologický ústav Přírodovědecké fakulty University Komenského, Bratislava :

Stanovenie zlata v geologických materiáloch atómovou absorpčnou spektroskopiou

I. R u b e š k a , J. V e j v o d o v á , Ústřední ústav geologický, Praha :

Stanovení antimonu atomovou absorpční spektrometrií s použitím vývoje stibinu

J. S p o n a r , A. Š e f f l o v á , Krajská hygienická stanice, Brno :

Zkušenosti se stanovením olova

E. F e r i a n č i k , Geologický prieskum n.p., Spišská Nová Ves :

Uplatnenie atómového absorpčného spektrometra Varian 1200 pri analýze rudných vzoriek

M. N e p r a š , Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice-Rybitví :

Spektrální a fotochemické vlastnosti konjugovaných sloučenin z hlediska charakteru jejich nejnižšího elektronového excitovaného stavu

K. V y t ř a s , V. M a c h , S. K o t r l ý , Katedra analytické chemie VŠCHT, Pardubice :

Výpočet souřadnic v kolorimetrických měrných systémech z elektronových absorpčních spekter a jejich využití při studiu chemických indikátorů

J. K r á č m a r , J. K r á č m a r o v á , Státní ústav pro kontrolu léčiv, Praha :

Absorpce v ultrafialové oblasti spektra a její využití v analýze léčiv s některými základními cyklickými chromofory

M. T i t z , Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice :

Studium anelace a topologie u lineárních p-chinonů a jejich vliv na elektronová absorpční spektra těchto molekul

A. N o v á k , Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice :

Měření závislosti kvantového výtěžku fluorescence na teplotě

F. Ž a l o u d e k , Fyzikální ústav Karlovy university , Praha:

Elektronová spektra bazí nukleových kyselin

J. M a j e r , V. Ř e h á k , VŠCHT, Praha :

Fotochemie aromatických triazenů

V. Ř e h á k , M. T i t z , VŠCHT Pardubice a Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice :

Elektronová absorpční spektra azosloučenin

M. Z á v ě t o v á , Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha :

Studium optických vlastností polovodivých skel v infračervené oblasti

I. P e l a n t , K. V a c e k , Katedra chemické fyziky, Matematicko-fyzikální fakulta University Karlovy, Praha :

Čarová emise u krystalu halogenidu po ozáření rubínovým laserem

L. P a j a s o v á , B. V e l i c k ý , Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha :

Optické vlastnosti amorfního uhlíku v širokém spektrálním oboru

R. S o v i č k a , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie

J. Heyrovského ČSAV, Praha :

Výkonný zdroj infračerveného záření

J. M o r a v e c , Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy ,
P. K l í m a , Tesla Výzkumný ústav pro sdělovací techniku,
Praha, I. G r e g o r a , Ústav fyziky pevných látek ČSAV,
Praha :

Vibrační spektra komplexních iontů v mřížce CaSO₄

J. K n í ž e k , Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice:
Vibrační spektra a polymorfie organických sloučenin

A.A. H a s a n e i n , I. H u b a č , Š. K o v á č , Katedra
organické chemie SVŠT, Bratislava :

CNDO/2 výpočty intermolekulární vodíkové vazby mezi methano-
lem a některými molekulami - protonakceptory

S. H i l g a r d , M. H o r á k , A. V y s t r č i l ,
Přírodovědecká fakulta University Karlovy, Praha :
Spektroskopické studium solvatace kyseliny octové nepolárními
rozpuštědly

M. P i s á r č i k , Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava:
Štúdium vlastností sklených fáz metodou IČ spektroskopie

K. S a r k a , Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava :
Možnosti použití Ramanovej spektroskopie pri štúdiu tavenín

K. K u b o ň , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava :
Automatická optická spektrometrie v hutnictví železa

Z. E r s e p k e , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava :
Spektrometrická analýza nevodivých materiálů

E. P l š k o , Geologický ústav Přírodovědecké fakulty Univer-
sity Komenského, Bratislava :
Význam a perspektivy spektrometrickej analýzy nerastných
materiálov

V. Š p í r k o , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Hey-
rovského ČSAV, Praha :
Některé otázky spojené s výpočtem spektroskopických konstant
z experimentálního spektra

P. K l í m a , Tesla - Výzkumný ústav pro sdělovací techniku
A.S.Popova, Praha :
Interpretace vibračních spekter krystalů

M. N e p r a š , Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice:
Styčné plochy mezi elektronovou spektroskopií a kvantovou che-
mií

F. Š t o r e k , Výzkumný ústav hutnictví železa, Praha :
Chemická homogenita a její hodnocení

B. B i e b e r , A. S t e j s k a l o v á , Státní výzkumný
ústav materiálu, Brno :
Stanovení hořčíku ve feritické a perlitické fázi tvárné liti-
ny laserovou spektrální mikroanalýzou

V. J á n o š í k o v á , Výzkumné ústavy VŽKG, Ostrava :
Využití metod spektrální mikroanalýzy v metalurgickém výzkumu

D. E r ö s s , Tesla - Výzkumný ústav vakuové elektrotechniky,
Praha :

Využití pulsních laserů pro emisní spektrální analýzu

Z. H a b r m a n , Státní výzkumný ústav sklářský, Hradec
Králové :

Použití obřích pulsů laseru při analýze skel

K. S e r á t o r o v á , Výzkumný ústav hutnické keramiky,
Bratislava :

Laserová mikroanalýza při výzkume keramických materiálů

J. K o z á k , S. K r i š t o u f k o v á , L. P a v e l ,
Katedra půdoznalství VŠZ, Praha :

Mikroanalýza železitomanganičitých kongrecí laserovou mikro-
sondou IMA-1 a elektronovou mikrosondou ARL-EMX

M. P a v l í č e k , L. V á c l a v í k o v á , Ústav jader-
ných paliv, Zbraslav :

Kvantitativní elektronová mikroanalýza binárních a ternárních
intermetalických fází zirkonia

M. M a t h e r n y , Katedra chemie Hutnické fakulty VŠT,
Košice :

Spektrohemický matrixefekt při analýze nevodivých materiálů

E. Krakovská, M. Matherny, Katedra chémie
Hutníckej fakulty VŠT, Košice :

Štúdium teplot a matrixefektu v MgO sústave časovo rozloženou
spektroskopíou

K. Flórián, M. Matherny, Katedra chémie Hutníckej
fakulty VŠT, Košice :

Porovnanie budenia MgO matrixov v oblúkovom a strednonapätovom
iskrovom výboji

N. Pliešovská, K. Flórián, Katedra chémie
Hutníckej fakulty VŠT, Košice :

Sledovanie matrixefektu v kysličníkových sústavách za použitia
presypových medených elektród

A. Nová, Ústřední ústav geologický, Praha :

Omezení vlivu osnovy při spektrochemickém stanovení skupiny
prvků v silikátových horninách

J. Kubová, E. Plško, Geologický ústav Přírodovědeckej
fakulty Univerzity Komenského, Bratislava :

Štúdium možnosti korekcie intenzity spektrálnych čiar na
vplyv teploty a tlaku elektrónov

J. Medvedě, Geologický ústav SAV, J. Kubová,
E. Plško, Geologický ústav Přírodovědeckej fakulty Uni-
verzity Komenského, Bratislava :

Problémy spektrochemickej analýzy mikroprvkov v základných
uhličitanových horninách

L. Koller, M. Matherny, Katedra chémie Hutníckej
fakulty VŠT, Košice :

Spektrochemické vlastnosti niektorých prvkov vo viditeľnej
oblasti spektra

J. Jakeš, J. Štokr, R. Ekwal, B. Schneider,
Ústav makromolekulární chemie ČSAV, Praha :

Možnosti použití infračervené spektroskopie pro stanovení ba-
riéry vnitřní rotace v molekulách

L. Musil, J. Paleček, J. Kuthan, Katedra
organické chemie VŠCHT, Praha :

Ultrafialová absorpční spektra a konformace dihydropyridino-
vých derivátů

A. Š. Nagy, L. Szűcs, VVÚ Farmaceutickej fakulty
Univerzity Komenského, Bratislava :

Infračervená spektrá diazochalkónov - štúdium rotačných izo-
mérov

A. Kanala, Š. Kováč, Chemická fakulta SVŠT, Bra-
tislava :

Štúdium konformácii 2-hydroxy-difenylmetánu, 2-hydroxy-dife-
nyloxidu, 2-hydroxy-difenylsulfidu a 2-hydroxy-difenylselenidu

B. Strauch, M. Semler, J. Kubizňák,
Katedra anorganické chemie Přírodovědecké fakulty Karlovy uni-
versity, Praha :

Vibrační a elektronová spektra dusičnanové částice v dusična-
nech lanthanoidů

L. Žilka, Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioisoto-
pů, Praha :

Použití infračervené spektrometrie k analýze ¹⁴C značených
sloučenin

J. Klaban, I. Dobáš, Výzkumný ústav syntetických
pryskyřic a laků, Pardubice :

Sledování reakce epoxiskupiny s aminy v blízké infračervené
oblasti

I. Diačík, O. Durčová, I. Mitterpach,
Výzkumný ústav chemických vláken, Svit :

Možnosti využitia infračervenej absorpčnej spektroskopie pri
štúdiu vláknotvorných polymérov

V. Bekárek, J. Socha, Palackého universita, Olo-
mouc, VŠCHT Pardubice :

Studie polárních vlivů na spektrální charakteristiky sulfona-
midů

M. R y s k a , Ústav makromolekulární chemie ČSAV, Praha :
Hmotová spektra β -diketonových chelátů 1,6-dichlor-1,5-cyklo-
oktadienrhodia a jejich korelace s rychlostmi polymerizace
chloroprenu, iniciované těmito komplexy

M. D o b i a š , Katedra jadrovej chemie Prírodovedeckej fa-
kulty Univerzity Komenského, Bratislava :

Štúdium hmotnostných spektier niektorých β -diketonátových
chelátov

J. P a l e č e k , J. K u t h a n , Katedra organické chemie
VŠCHT, Praha :

Hmotová spektra N-substituovaných 2,4,4,6-tetramethyl-3,5-
-dikyan-1,4-dihydropyridinu

M. R y s k a , Ústav makromolekulární chemie ČSAV, Praha :
Fenomenologické štúdium absorpčních procesů na emitorech při
analýzách směsí parafinů metodou ionizace polem

Z. H e r m a n , V. P a c á k , Ústav fyzikální chemie a elek-
trochemie J. Heyrovského ČSAV, Praha :

Kinematika srážkové disociace $\text{CH}_4^+ + \text{He} = \text{CH}_3^+ + \text{H} + \text{He}$

M. C u k r , Výzkumný ústav pro sdělovací techniku A.S. Popo-
va, Praha :

Hmotově spektrografické stanovení obsahu stopových příměsí
v objemu nevodivých látek vysoké čistoty

A. Š v e c , Katedra jadrovej chemie Prírodovedeckej fakulty
Univerzity Komenského, Bratislava :

Elektronický obvod pre vytváranie logaritmu vstupného signálu

V. H u l í n s k ý , Katedra silikátů VŠCHT, Praha :
Lokální mikroanalýza

M. L á z n í č k a , Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha :
Spektroskopie povrchů

V. S v o b o d a , Ústav pro výzkum, výrobu a využití radio-
isotopů, Praha :

Plasmové zdroje pro emisní spektrální analýzu

Z. H e r m a n , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Hey-
rovského ČSAV, Praha :

Současné postavení hmotové spektrometrie

V. Č e r m á k , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Hey-
rovského ČSAV, Praha :

Současný stav spektroskopí založených na měření energie
elektronu

A. F o j t í k , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Hey-
rovského ČSAV, Praha :

Ultrarychlá spektrometrie

I. K l e i n m a n n , V. S v o b o d a , Ústav pro výzkum,
výrobu a využití radioisotopů, Praha :

O použití porovnávacích prvků v emisní spektrální analýze

E. P l š k o , Geologický ústav Prírodovedeckej fakulty
Univerzity Komenského, Bratislava :

Vplyvy pôsobiace na parametre rozptylových diagramov

A. L a v r i n , Katedra chemie Hutníckej fakulty VŠT, Košice:
Nové aspekty vyhodnocovania rozptylových diagramov

A. Š v e h l a , M. S a l c e r o v á , Oravské ferozliati-
nárske závody n.p., Istebné, O. S c h i e s s l , ŠDVÚ, Bra-
tislava :

Porovnanie účinnosti homogenizácie práškových vzoriek pre
spektrálnu analýzu achátovaním a pri použití vibrátora.

O. F i l o , K. K l e s t e r m a n n , Katedra chemie Hutní-
ckej fakulty VŠT, Košice :

Korelácia alkalických prvkov pri buzení v plazmovom zdroji

L. Š v a r d a l a , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava:
Použití počítačů na automatických spektrometrech

M. H o š p e s , V. S v o b o d a , Ústav pro výzkum, výrobu
a využití radioisotopů, Praha :

Některé otázky použití malých počítačů při spektrografické
analýze

J. V o č k o v á , V. S v o b o d a , Ústav pro výzkum, výro-
bu a využití radioisotopů, Praha :

Stanovení metodou přídavků s použitím optimalizace malým počítacem

J. M u s i l , Kovohutě Mníšek pod Brdy :

Stanovení stopových obsahů olova a cínu v ocelích, některých ferroslitinách a jiných kovových materiálech metodou atomové absorpční spektrometrie

M. M á t l , Geologický průzkum, Ostrava :

Spektrální analýza slinutých karbidů

Š. M e l u š , Elektrokarbon n.p., Topolčany :

Spektrálně uhlíkové elektródy

K. V a c e k , Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy :

Aplikační využití EPR spektroskopie

Z. P r á š i l , R. Š t ě d r ý , Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů, Praha :

Studium γ -radiolysy dichlorethanu metodou ESR

M. H á j e k , M. S u c h á n e k , Z. K s a n d r , L. V o d i č k a , J. H l a v a t ý , VŠCHT, Praha :

Příspěvek k použití posunových činidel v NMR spektroskopii

J. K a r h a n , M. H á j e k , Z. K s a n d r , VŠCHT, Praha:
Použití posunových činidel ke kvantitativní NMR analýze

J. S p ě v á č e k , B. S c h n e i d e r , Ústav makromolekulární chemie ČSAV, Praha :

Studium struktury stereokomplexu polymetylmakrylátu pomocí NMR spekter



ATOMOVÁ SEKCE

Odborná skupina instrumentálních radioanalytických metod

7.pracovní schůze se konala dne 24.dubna 1974 v Mikrobiologickém ústavu ČSAV v Praze. Schůzi řídil Ing.Miloslav Vobecký CSc.

Byly předneseny přednášky :

J. J u n a , Ústřední ústav geologický, Praha :
Teoretické základy RTG-fluorescence.

K měření fluorescenčního RTG záření bylo poprvé použito polovodičových detektorů (tzv. bezdisperzní RTG spektrometrie) nezávisle na sobě ve dvou laboratořích /1, 2/, z nichž jedna byla v Československu. Bylo to umožněno v té době vysokým standardem polovodičové detekční techniky u nás. I když jsme tehdy naznačili všechny možnosti této nové techniky a upozornili na ně všechny potenciální zájemce, k jejímu dalšímu rozšíření u nás došlo až po létech, když začínala být ve světě široce používána v celé řadě pracovišť. Je tedy jistě správné a potěšitelné, že této technice věnuje Čs.spektroskopická společnost pozornost.

Následující stať má spíše osvěžit znalost některých fyzikálních pojmů a principů z oboru RTG-spektrometrie pracovníkům jaderných oborů a nepřináší tedy nic nového a zajímavého pro pracovníky klasické RTG spektrometrie.

Při měření RTG fluorescence polovodičovými detek-

tory se k jejímu buzení nejčastěji používá záření γ z radioaktivních přechodů. Nejčastěji používanými zářiči jsou ^{55}Fe , ^{57}Co , ^{109}Cd , ^{238}Pu , ^{241}Am a ^{143}Pm zabudované do hliníku, v němž vzniká spojitě brzdné záření z beta aktivity ^{143}Pm . Primární záření při průchodu měřeným materiálem způsobí - mezi jiným - excitaci atomů ozařované látky, která při deexcitaci vyzařuje své charakteristické rentgenové spektrum. Měřením energie tohoto záření můžeme určit, které prvky jsou ve vzorku přítomné, z intenzity můžeme usuzovat - alespoň v prvním přiblížení - na koncentraci fluoreskujících prvků.

Značení jednotlivých spektrálních čar je spojeno se strukturou elektronových slupek atomu. Při přechodu elektronů na hladinu K vzniká záření serie K, s hladinou L je svázána serie L atd. Další indexování čar symboly α_1 , α_2 , β_1 , β_2 , γ , ... je nedůsledné, protože nerespektuje kvantově mechanické posloupnosti a je dáno spíše historickým vývojem RTG spektroskopie. Nicméně je nejpoužívanějším značením. Přiřazení značení k jednotlivým přechodům tak, jak je dnes vžit, je uvedeno v různých učebnicích fyziky, nebo příručkách /3/. Důslednější, ale méně používané značení spektroskopické lze nalézt v každé učebnici kvantové mechaniky /4/.

Charakteristickou veličinou RTG záření je jeho energie. Rovná se rozdílu energií elektronových hladin mezi nimiž dochází k přechodu a pohybuje se od stovek elektronvoltů až po desítky kiloelektronvoltů. Místo energie se velmi často (opět z historických důvodů) používá k charakterizování kvant záření jejich vlnová délka. Vzájemný vztah vlnové délky a energie je dán rovnicí

$$E \cdot \lambda = 12,3981 \text{ (}\AA \text{ keV)},$$

kde E je energie kvanta v keV, λ jeho vlnová délka v \AA .

Intenzity RTG čar jsou - obecně - určeny maticovým prvkem příslušného přechodu. V tabulkách se obvykle udávají relativní intenzity, normované intenzitou čáry α_1 příslušné serie. Tyto relativní intenzity čar velmi silně závisí na Z.

Při průchodu RTG záření hmotou lze pozorovat tři hlavní druhy interakcí :

1. koherentní rozptyl (Rayleighův - vlnová délka kvant se

prakticky nemění)

2. inkohorentní rozptyl (Comptonův - vlnová délka se zvětší o $\Delta\lambda = 0,0432(1 - \cos\phi)$, kde ϕ je úhel mezi dopadajícím a rozptýleným paprskem)
3. absorpce (kvantum zaniká a jeho energie se rozdělí na ionizační energii příslušné hladiny a kinetickou energii uvolněného fotoelektronu).

Koherentní rozptyl převládá nad inkohorentním, je-li vazebná energie rozptylujícího elektronu větší než energie dopadajícího záření a obráceně.

Absorpce je kvantitativně charakterizována tzv. lineárním absorpčním koeficientem μ definovaným známým vztahem

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu x}$$

který udává zeslabení absorpcí dopadajícího záření o intenzitě I_0 po průchodu absorpčním prostředím o tloušťce x.

Častěji se používá tzv. hmotový absorpční koeficient

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho}$$

kde ρ je hustota absorpčního prostředí.

Někdy se také používá atomový absorpční koeficient

$$\mu_t = \frac{\mu}{N}$$

kde N je počet atomů na cm^3 , nebo konečně molární absorpční koeficient

$$\mu_{\text{MOL}} = \frac{\mu}{\rho} A$$

kde A je atomová váha.

Absorpční koeficienty - obecně - s klesající energií rostou. Avšak klesne-li energie pod ionizační energii některé hladiny, klesne hodnota absorpčního koeficientu prakticky nespojitě - vznikne tzv. absorpční hrana. Závislost absorpčního koeficientu na energii a atomovém čísle prvku lze vyjádřit vztahem

$$\mu = KZ^4 E^{-3}$$

(zákon Bragg-Pierceův), kde konstanta K se na absorpční hraně mění skokem.

Složitá závislost absorpčního koeficientu na energii a atomovém čísle působí vážné potíže při vyhodnocování intenzit fluorescenčního záření. Je-li vzorek složen z několika prvků, pak jedna a tatáž spektrální čára je různě pohlcována ve vzorcích různého složení, protože absorpční koeficient se od vzorku ke vzorku mění. Může se stát, že spektrální čára jednoho prvku leží velmi blízko se strany vyšších energií absorpční hraně jiného prvku. Pak je tato spektrální čára silně (tzv. selektivně) absorbována a naopak "přibuzuje" spektrum prvku druhého. Efektům tohoto druhu (někdy k nim ještě přistupují efekty spojené s granulometrií a krystalickou strukturou vzorku) se říká matrix-efekt a na jeho potlačení se používá celá řada postupů, jejichž popis by přesáhl rámec tohoto referátu. Důkladný rozbor tohoto problému najde zájemce např. v práci /5/.

Při měření intenzit RTG záření počítáme kvanta rentgenového záření, jejichž počet je podřízen Poissonovu zákonu. Je-li hrubá intenzita spektrální linie dána číslem p a pozadí n, pak čistá intenzita p-n je zatížena chybou

$$e = \frac{\sqrt{p+n}}{p-n}$$

která se v literatuře uvádí jako relativní statistická (tj. Poissonovská) chyba stanovení intenzity linie. Je-li čistá intenzita linie úměrná obsahu prvku ve vzorku, je e zároveň relativní chybou ve stanovení obsahu tohoto prvku ve vzorku. Tento předpoklad nebývá vždy splněn. Měříme-li např. pozadí za úpatím spektrální linie (k čemuž můžeme být vedeni rozumnými důvody), pak je závislost veličiny (p-n) - obecně - také lineární funkcí koncentrace prvku ve vzorku (v malých koncentračních rozsazích), ale regresní přímka neprochází počátkem souřadnic. Pak je chyba e dána vztahem

$$e = \frac{\sqrt{p+n}}{p-n+q/k}$$

kde k a q jsou regresní parametry kalibrační přímky.

Vynesením výrazu pro chybu e do log-log souřadnic získáme soustavu přímek (s parametrem e), které nám usnadní rychlé stanovení statistické (Poissonovské) chyby měření, příp. s korekcí na podíl q/k.

V předneseném referátu jsem se mohl jen letmo dotknout některých otázek souvisejících s RTG fluorescencí. Otázkám spojeným s polovodičovými spektrometry a porovnání disperzních a polovodičových spektrometrů budou věnovány samostatné referáty. Toto setkání věnované bezdisperzní RTG spektrometrii jistě není posledním, k němuž na půdě Čs. spektroskopické společnosti dochází a bylo by vhodné některé z dalších setkání věnovat dílčím a specializovaným otázkám.

Literatura

- /1/ H.R.Bowman, E.K.Hyde, S.G.Thompson, R.C.Jared : Science 151 (1966) 562
- /2/ J.Kajfosz, K.Konečný, J.Juna : Použití polovodičových detektorů pro nedestrukční analýzu pomocí fluorescenčního záření x. ÚJV RPRT 1659 (1966).
- /3/ B.M.Javorskij, A.A.Detlaf : Spravočnik po fizike, Moskva 1968
- /4/ L.D.Landau, E.M.Lifšic : Kvantovaja mecharika, Fizmatgiz 1963
- /5/ T.Shiraiva, N.Fusimu, Jap.J.Appl.Phys. 5 (1966) 886

M. V i d r a , Ústav jaderného výzkumu ČsKAE,
 Řež u Prahy : Polovodičové detektory pro rentgen-fluorescenční analýzu.

Široký rozvoj spektrometrických polovodičových detektorů v polovině 60-tých let, které byly původně určeny pro měření gama záření v oboru energií od několika desítek keV do několika MeV, byl velmi záhy po svém vzniku aplikován i na měření nízkých energií, emitovaných vzbuzenými elektronovými orbity (zejména K a L).

V roce 1966 sestrojili Elad a Nakamura /L 1/ první spektrometrický systém s chlazeným předzesilovačem, který

měl rozlišovací schopnost lepší než 1 keV na energii 14,4 keV. Záhy po té následovala další zlepšení, k současnému datu byly již sestaveny spektrometrické systémy s rozlišovací schopností kolem 100 eV v energetickém oboru do 2 keV /L 2, L 3/.

Technologie přípravy polovodičových detektorů.

Z hlediska technologické přípravy lze rozdělit polovodičové detektory (detektory zhotovované z nejrůznějších materiálů, jako např. Si, Ge a pod.) do dvou kategorií

- A - driftované detektory - např. Si/Li/, Ge/Li/
- B - detektory s PN přechodem (nejčastěji barierové) - Si, Ge, GaAs, CdTe a pod.

První skupina se pro měření měkkého fotonového záření používá častěji (90 - 95 %), o druhé skupině lze mluvit jako o perspektivní.

Na obr. 1a je znázorněna principiálně strukturální stavba driftovaného detektoru (např. Ge/Li). Pro zhotovení vlastního detektoru je nutné nejprve z vhodného monokrystalu Ge vyříznout destičku požadovaných rozměrů. Do takovéhoho rozměru se z jedné strany provede difuze Li (při zvýšené teplotě kolem 300 - 400°C). Po té se působením přiloženého elektrického napětí na PN přechod provádí drift Li do objemu monokrystalu, při kterém dochází ke kompenzaci příměsí typu P výchozího materiálu.

Uvedeným technologickým procesem lze bez větších obtíží dosáhnout kompenzovanou radiačně citlivou oblast ochuzenou o volné nosiče (po ochlazení na vhodnou teplotu) silnou několik mm (obvykle je standartizována na 3 nebo 5 mm). Na takto připravený vzorek se z opačné strany než-li je difundované Li (po předchozím mechanickém a chemickém opracování) napaří tenká vrstva zlata, která na hotovém detektoru má jednak význam sběrného kontaktu, jednak tvoří transparentní okénko pro RTG záření.

Vzhledem k tomu, že detektory z Ge, resp. Si vykazují při pokojové teplotě značně vysoké proudy (cca 10^{-2} až 10^{-4} A pro Ge, 10^{-5} až 10^{-7} A pro Si; velikost proudu závisí na fyzikálních parametrech použitého materiálu, velikosti pře-

chodu, objemu detektoru, úpravě povrchů a pod.) a jelikož by takoveto proudy svou šumovou složkou přispívaly hlavní měrou ke zhoršení rozlišovací schopnosti (např. proud 10^{-7} A při 2 μ sec tvarování má šumovou složku téměř 10 keV) jsou detektory vkládány do kryostatů (obr. 2) a chlazeny obvykle na teplotu blízkou teplotě kapalného dusíku. Svodové proudy u vychlazených detektorů pak klesají na 10^{-13} až 10^{-10} A u germaniových detektorů, resp. na 10^{-15} až 10^{-12} A u křemíkových detektorů. Šumová složka těchto proudů, zejména v případě detektorů z křemíku, je obvykle zanedbatelná. Aby nedocházelo k absorpci záření X v materiálu kryostatu, je jako vstupní okénko používáno berylium o tloušťce 5 - 200 μ m, podle toho jaká je nejnižší energie, již má systém bez značného poklesu účinnosti měřit (obr. 4).

Podobným technologickým postupem jako driftované detektory jsou připravovány detektory s jedním přechodem PN (event. barierové). U těchto prvků odpadá proces driftování; aby však bylo dosaženo dostatečně hluboké radiačně citlivé oblasti, je jako výchozího materiálu používáno Ge, resp. Si o mimořádně vysoké čistotě (obvykle bývá tento materiál 100 až 1000x čistší než-li materiál pro driftované detektory). Vysoká čistota pak umožňuje přiložením pracovního napětí na přechod dosáhnout radiačně citlivou oblast, hlubokou až několik mm.

Princip činnosti polovodičových detektorů.

Vstupující RTG záření o energii E_x je následkem interakce s krystalem (v oblasti nízkých energií jde prakticky pouze o foto-efekt) konvergováno na soubor \bar{n} párů elektron - díra

$$\bar{n} = \frac{E_x}{\bar{w}}$$

kde \bar{w} je střední energie, potřebná k tvorbě 1 páru elektron-díra ($\bar{w}_{Si} \sim 3,6$ eV, $\bar{w}_{Ge} \sim 2,9$ eV).

Následkem silného elektrického pole ($E = 100 - 200$ V/mm) jsou elektrické náboje rychle odsáty z citlivé oblasti detektoru a na výstupu z tohoto prvku se objeví elek-

trický impulz o náboji

$$\bar{Q} = q \cdot \bar{n}$$

q element. náboj $1,6 \cdot 10^{-19}$ C.

Tento elektrický impulz je dále zpracováván speciálními elektronickými obvody, aby bylo dosaženo nejlepšího rozlišení.

Vlastní proces tvorby souboru párů elektron-díra je statistického charakteru. Pokud by počet párů byl řízen pouze Poissonovou statistikou, byl by rozptyl počtu částic

$$\sigma' = \sqrt{\bar{n}} = \sqrt{\frac{E_x}{W}}$$

Ve skutečnosti proces vzniku párů je do jisté míry vlivem násobných interakcí korelován, z těchto důvodů je Poissonovská distribuce modifikována, tato modifikace se provádí zavedením tzv. Fano faktoru F, takže

$$\sigma = \sqrt{F \frac{E_x}{W}} \quad 0 < F < 1$$

v praxi bývá zvykem vyjadřovat rozlišení jako šířku píku v poloviční výšce, takže úpravou předchozího vztahu dostaneme

$$FWHM = 2,35 \sqrt{F \cdot \bar{w} \cdot E} \quad (\text{eV})$$

FWHM rozlišení v poloviční výšce píku (eV).

Hlavní výhoda Si/Li/ a Ge/Li/ detektorů spočívá zejména v relativně nízké energii, potřebné k tvorbě 1 páru elektron-díra, tedy v lepší statistice (tabulka I a obr. 3 - průměrné energie pro některé detektory a orientační srovnání píků z různých detektorů pro záření X).

Porovnání jednotlivých detektorů.

Z tabulky I (resp. z obr. 3) je patrná výhoda polovodičových detektorů proti některým detektorům dříve používaným z hlediska spektrometrických měření. Vysoké rozlišení polovodičových detektorů vyplývá hlavně ze skutečnosti, že energie nutná k tvorbě párů elektron-díra je řádově nižší než-li např. u plynových detektorů. K dalším výhodám patří jejich vyšší účinnost, vyšší pohyblivost nosičů elektrických nábojů (rychlejší

ší náběh impulzu, kratší doba zotavení), výhodnější geometrie a pod.

Poněkud komplikovanější situace je v případě, jakmile začneme porovnávat mezi sebou systémy Ge/Li/ a Si/Li/. Na první pohled se zdá, že je výhodnější používat systémy založené na bázi germania, vzhledem k nižším energiím, nutným pro tvorbu párů elektron-díra (rovněž experimentálně ověřené hodnoty součinu $\bar{w} \cdot F$ jsou u germania nižší), a tedy v lepší statistice rozptylu počtu vzniklých párů. Ve skutečnosti se však podařilo v oblasti nízkých energií dosáhnout lepšího rozlišení naopak pro systémy Si/Li/. Hlavní příčinu je nutno hledat hlavně v nižších proudech křemíkových detektorů. Další nevýhoda Ge/Li/ detektorů je pokles účinnosti nad energií 11 keV, která je způsobena K absorbcí v mrtvé vrstvě germania a která v celé řadě případů znesnadňuje rozbor (hlavně kvantitativní) spektra (obr. 4).

Na druhé straně však, pokud řešení problému spočívá v měření širokého oboru energií (od několika keV do cca 100 keV), je vzhledem k tomu, že germanium má značně vyšší Z ($Z_{\text{Ge}} = 32$, $Z_{\text{Si}} = 14$) a vzhledem k faktu, že účinnost pro fotoefekt je zhruba úměrná Z^5 , je výhodnější použít systém Ge/Li/. Jistou nevýhodou Ge/Li/ systémů může být v některých případech právě vysoké Z - vzhledem k přebuzení následkem registrace vysokých energií a k vyššímu pozadí v oblasti nízkých energií.

Velkou nevýhodou systémů, kde je citlivé oblasti dosaženo pomocí kompenzace lithiem, je nutnost trvalého chlazení. I když Si/Li/ systémy jsou teplotně daleko odolnější (někteří výrobci garantují zachování parametrů systémů při několikanásobném ohřátí na pokojovou teplotu), hrozí u obou typů zhoršení rozlišovací schopnosti následkem tzv. rozdriftování.

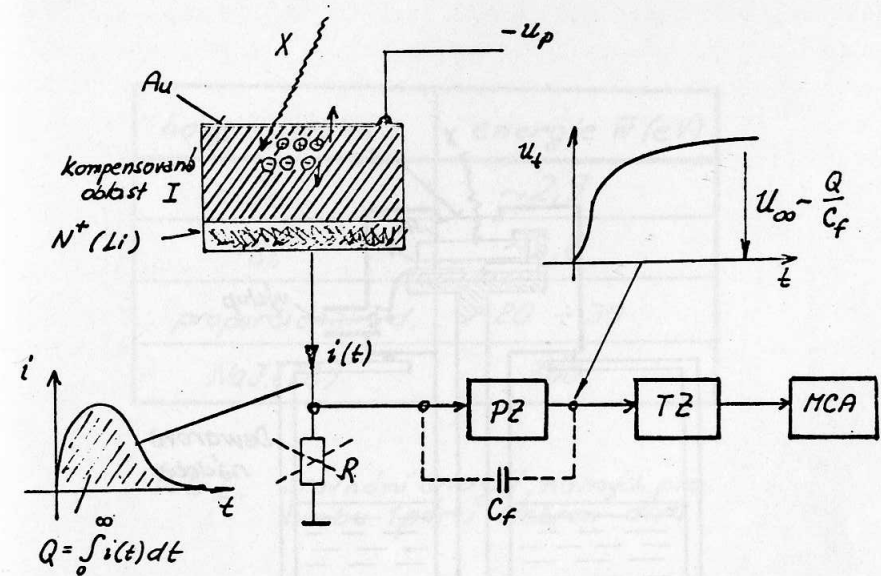
Vzhledem k výše uvedeným nevýhodám lze očekávat, že v budoucnu budou tyto detektory nahrazeny detektory bariérovými (nebo lépe detektory s jedním přechodem PN) - obr. 1b. Tyto detektory bude možné skladovat neomezeně dlouhou dobu při pokojové teplotě /L 4/. Jistou nevýhodou bariérových systémů je nutnost použití extrémně čistého výchozího materiálu, který

je např. u Ge zhruba 10x dražší než-li pro systémy driftované. Rovněž vlastní příprava těchto detektorů klade značně vyšší nároky zejména na čistotu v technologickém procesu. K nevýhodám těchto systémů můžeme rovněž přičíst skutečnost, že elektrické pole není homogenní.

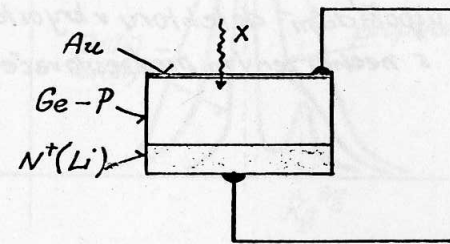
Závěr.

Ze stručného rozboru problematiky detektorů RTG zařízení lze shrnout, se zvláštním zřetelem na spektrometrické požadavky, že detekční systémy na bázi germania a křemíku není možné, bez výrazné ztráty rozlišovací schopnosti, nahradit detektory jiného typu. Polovodičové detektory dosáhly v oblasti spektrometrických měření nízkých energií takového stupně, že prakticky nepřispívají ke zhoršení rozlišení celého systému. V oboru těchto energií je hlavní těžiště problému nízkošumová elektronika. Vstupní obvody těchto zařízení jsou hlavním "zdrojem" zhoršeného rozlišení. Z obr. 5 je patrné, jaký je význam elektroniky právě v oblasti těchto nízkých energií.

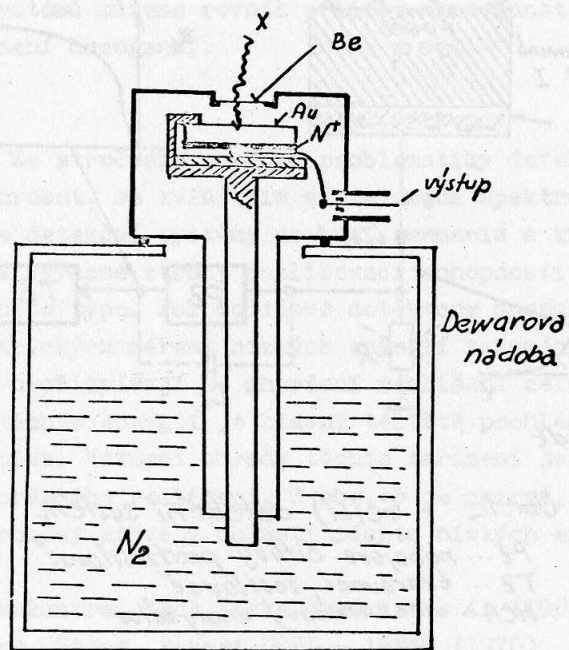
- /L 1/ Elad, Nakamura, Nucl.Instr. and Meth. 41 (1966) 161
- /L 2/ Goulding, Stone, Report UCRL - 19860 (1970)
- /L 3/ Elad, IEEE Trans. NS 19/1 (1972) 403
- /L 4/ Tavendale, Nucl.Instr. and Meth. 84 (1970) 314 , a některé firemní prospekty



Obr.1a - Ge(Li) detekční systém
 PZ... nábojově citlivý předzesilovač
 TZ... tvarovací zesilovač
 MCA... vícekanálový analyzátor



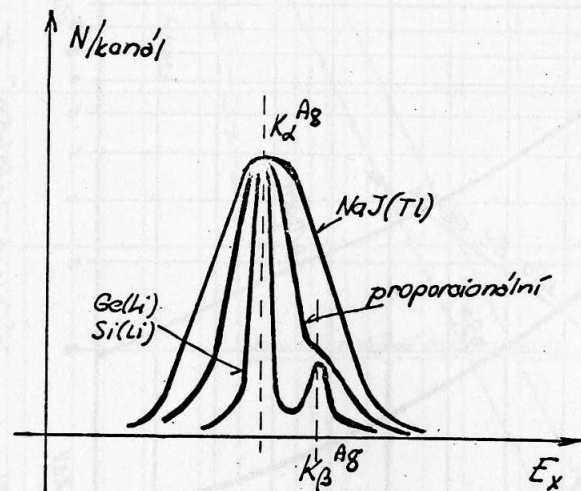
Obr.1b - Ge barierní detektor
 (oblast mezi Li a Au - výchozí p materiál)



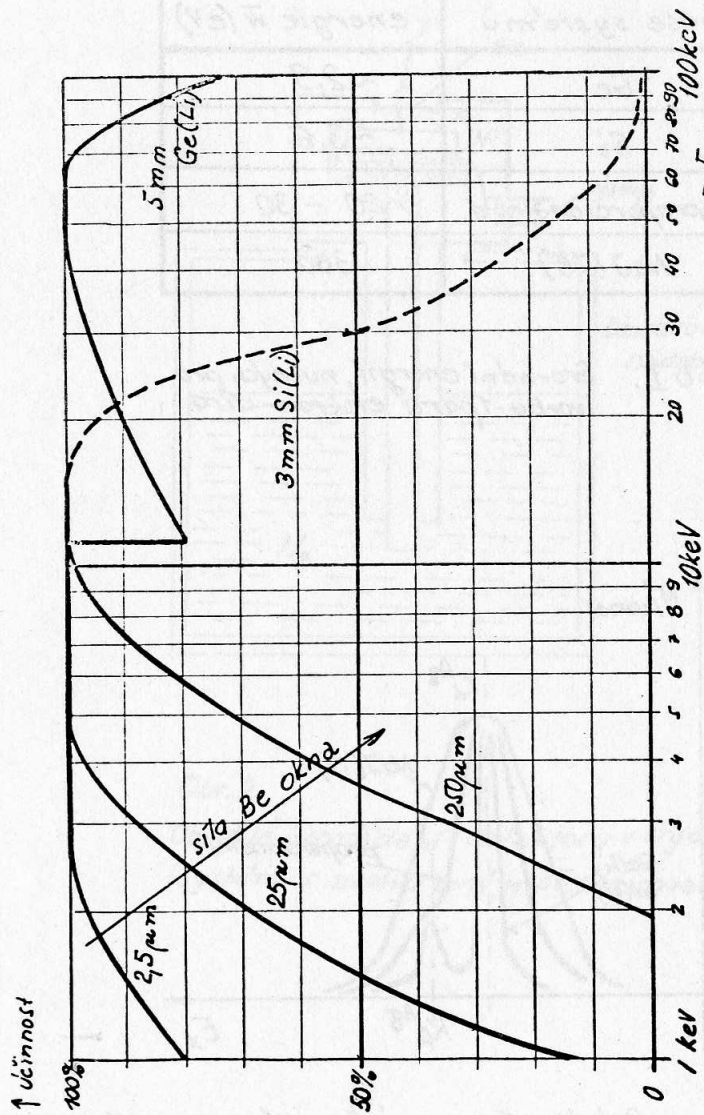
Obr. 2
Obvyklé uspořádání detektoru v kryostatě
(systém s neeklazeným předzesilovačem)

base systému	energie \bar{w} (eV)
Ge	$\sim 2,9$
Si	$\sim 3,6$
proporcionální	$20 \div 30$
NaJ(Tl)	300

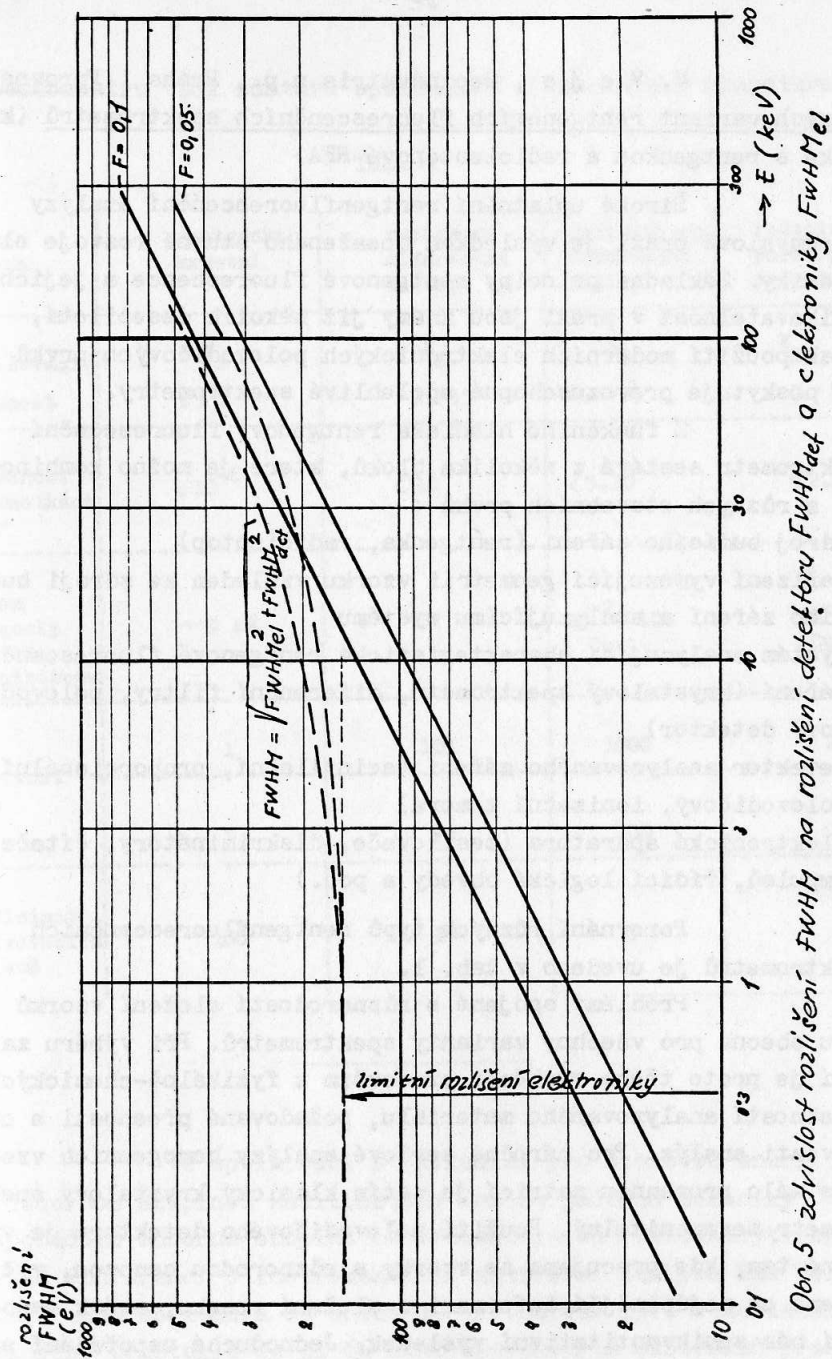
Tab. I. Srovnání energií, nutných pro tvorbu 1 páru elektron-díra



Obr. 3 - Relativní srovnání rozliš. schopnosti pro některé typy detektorů



Obr. 4 - Závislost detekční účinnosti na energii; tloušťce Be okna druhu a síle detektoru



Obr. 5 závislost rozlišení FWHM na rozlišení detektoru $FWHM_{\text{det}}$ a elektroniky $FWHM_{\text{el}}$

M. V e j s , Geoindustria n.p., Praha : Porovnání různých variant rentgenových fluorescenčních spektrometrů (klasická s rentgenkou a radioizotopová RFA)

Široké uplatnění rentgenfluorescenční analýzy v průmyslové praxi je výsledkem dosaženého stupně rozvoje elektroniky. Základní principy rentgenové fluorescence a jejich aplikovatelnost v praxi jsou známy již několik desetiletí, avšak použití moderních elektronických polovodičových prvků nám poskytuje provozuschopné spolehlivé spektrometry.

Z funkčního hlediska rentgenový fluorescenční spektrometr sestává z několika bloků, které je možno kombinovat z různých stavebních prvků :

- zdroj budícího záření (rentgenka, radioizotop)
- zařízení vymezující geometrii vzorku vzhledem ke zdroji budícího záření a analyzujícímu systému
- systém analyzující charakteristické rentgenové fluorescenční záření (krystalový spektrometr, diferenční filtry, polovodičový detektor)
- detektor analyzovaného záření (scintilační, proporcionální, polovodičový, ionizační komora)
- elektronická aparatura (zesilovače, diskriminátory, čítače impulsů, řídicí logické obvody a pod.)

Porovnání různých typů rentgenfluorescenčních spektrometrů je uvedeno v tab. 1.

Problémy spojené s různorodostí složení vzorků jsou obecné pro všechny varianty spektrometrů. Při výběru zařízení je proto třeba vycházet především z fyzikálně-chemických vlastností analyzovaného materiálu, požadované přesnosti a citlivosti analýz. Pro náročné seriové analýzy homogenních vzorků s málo proměnnou maticí je zatím klasický krystalový spektrometr nezaměnitelný. Použití polovodičového detektoru je výhodné tam, kde pracujeme se vzorky s různorodou osnovou, vyžadujeme co nejúplnější informaci o složení vzorku, avšak uspokojí nás semikvantitativní výsledek. Jednoduché uspořádání s radioizotopem a diferenčními filtry umožňuje improvizovat v těžko dostupných prostorách, v terénních podmínkách a pod. Základem úspěchu kterékoliv varianty rentgenového fluorescenčního

spektrometru však zůstává spolehlivá elektronická aparatura.

Tab. 1

buzení analyza	rentgenka krystal	rentgenka diferenční filtry	radioizotop diferenční filtry	radioizotop polovodičový detektor
rozlišovací schopnost	K_A $Z > 8$	K_A $Z > 35$	K_A $Z > 35$	$K_{A1}; K_{A2}$ $Z > 50$
světelnost v jednotkách 4π	$< 10^{-8}$	$< 10^1$	$< 5 \cdot 10^{-1}$	$< 2 \cdot 10^{-1}$
příkon rentgenky aktivita radioizotopu	$\sim 3 \text{ kW}$	$\sim \text{W}$	$10^{-2} - 100$ Cur.	$10^{-2} - 1$ Cur.
Fe Citlivost ppm	1	100	1000	10
Sz	1	50	100	1
Koeficient pořizovacích nákladů	100	10	5	70

Ve spolupráci s Čs.komisí pro atomovou energii a odbornou skupinou Radioisotopy Komise jaderné techniky ČVTS uspořádala odborná skupina instrumentálních radioanalytických metod Konferenci o instrumentální aktivační analýze IAA 74. Konference se konala ve dnech 3. - 7.června 1974 v Mariánských Lázních. Účastnilo se jí 68 československých odborníků pracujících v oblasti radioanalytických metod se zvláštním zaměřením na aktivační analýzu. Byla zde zastoupena pracoviště ČSAV, SAV, vysokých škol, výzkumných ústavů a průmyslových podniků.

Tomuto široce reprezentativnímu zastoupení prakticky všech našich pracovišť rozvíjejících a užívajících aktivační analýzu odpovídá i obsah jednotlivých přednesených příspěvků. Protože přednesené referáty nebudou vydány souborně, uvádíme jejich úplný seznam. Účastníkům konference podali informace o elektronických přístrojích a polovodičových detektorech odborní představitelé zahraničních firem : Laben, Milano (Dr.P.Forti - viz též seznam přednášek) a Universal Elektronik Import, Vídeň (Ing.J.Bachmayer). Na závěrečném zasedání zdůraznili účastníci význam konference tohoto profilu pro aktivní pracovníky v radioanalýze a doporučili uspořádat v příštím roce podobnou konferenci rozšířenou o tematiku z oblasti isotopové rentgenfluorescenční analýzy.

Byly předneseny přednášky :

L. M a l ý , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy :

Jaderně spektroskopické metody pro chemickou analýzu

I. O b r u s n í k , Ústav jaderného výzkumu , Řež u Prahy,
P. K o t a s , Výzkumný ústav pro sdělovací techniku A.S.Popova, Praha :

Srovnání aktivační analýzy s ostatními mikroanalytickými metodami

F. K u k u l a , K. M u d r a , Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy :

Využití zpožděných neutronů v aktivační analýze

J. Š i l a r , Katedra lékařské fyziky a nukleární medicíny LFH UK, Praha :

Kvalita detekčních systémů velkoobjemových scintilačních detektorů

J. Š á c h a , Fyzikální ústav SAV, Bratislava :

Využití (n, γ) reakcí pro analytické účely

J. K v í t e k , M. M a l e č k o v á , K. B a š e , J. P l e š e k , S. H e ř m á n e k , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy :

Stanovení boru v chromatogramech na tenké vrstvě pomocí jaderné reakce (n, α)

J. K v í t e k , V. H n a t o w i c z , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy, P. K o t a s , Výzkumný ústav pro sdělovací techniku A.S.Popova, Praha :

Nedestruktivní metoda zjištění prostorového rozložení příměsí boru v křemíkových monokrystalech

J. B a r t o š e k , I. K a š p a r e c , J. M a š e k , Geofyzika n.p., Brno :

Zpracování scintilačních spekter gama metodou nejmenších čtverců

J. B a r t o š e k , I. K a š p a r e c , J. M a š e k , Geofyzika n.p., Brno :

Příspěvek k měření spekter gama krátkodobých radionuklidů

V. K l i m e n t a kol. , Fyzikální ústav SAV, Bratislava :
Súčasná stanovenie kyslíka, fosforu a bárya v organických látkach aktivačnou analýzou pomocou neutrónov o energii 14 MeV

B. Ž i t ň a n s k ý , Výzkumný ústav zvaračský, Bratislava :
Niektoré možnosti v aktivačnej analýze neutrónovým generátorom použitím plurimatu

Š. B e d e r k a , Fyzikální ústav SAV, Bratislava :
Niektoré konštrukčné charakteristiky a vlastnosti neutrónového generátora NG-2 z hľadiska jeho použitia pre aktivačnú analýzu

J. P i v a r ě , Fyzikální ústav SAV, Bratislava :
Výroba TiT hrubých tríciových terčikov na Cu podložke

V. S č a s n á r , Fyzikální ústav SAV, Bratislava :
Stanovenie niektorých prvkov v mesačnej vzorke z Luny 20

P. F o r t i , Laben, Milano :
A Contribution to Differential Nonlinearity of an ADC with Sliding Scale

P. S c h i l l e r , Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského, Bratislava, A. S k á l o v á , Ústav experimentální mineralogie a geochemie ČSAV, Praha :
Eliminace některých rušivých faktorů při stanovení zlata v rostlinných a rudných materiálech metodou IAA

P. K o t a s , Výzkumný ústav pro sdělovací techniku A.S.Popova, Praha, I. O b r u s n í k , M. Š i m k o v á , Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy :

Aktivační analýza materiálů z technologie polovodičů

P. T e n d e r a , M. B u r i a n o v á , J. F r á n a , Státní výzkumný ústav materiálu, Praha :

Zjišťování obsahu některých mikrolegujících prvků ve speciálních ocelích s použitím INAA

M. V o b e c k ý , Ústav experimentální mineralogie a geochemie ČSAV, Praha , V. K o r u n o v á , L. P a v l í k , Izotopová laboratoř biologických ústavů ČSAV, Praha :

Stanovení některých stopových prvků metodou INAA a atomové absorpční spektrometrie v biologických materiálech

Z. Ř a n d a , Ústav nerostných surovin, Kutná Hora :

Některé pohledy na praktickou použitelnost aktivační analýzy při rutinných analýzách nerostných materiálů

A. M a š t a l k a , J. F r á n a , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy :

Možnosti stanovení prvků v některých materiálech pomocí INAA

J. F r á n a , A. M a š t a l k a , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy :

Vliv podmínek experimentu na přesnost výsledků při INAA

D. K u c h y ň k a , Státní výzkumný ústav ochrany materiálu, Praha, P. K o t a s , Výzkumný ústav pro sdělovací techniku A.S.Popova, Praha, F. K u k u l a , Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy :

Sledování kinetiky rozpouštění antikoročních ocelí metodou aktivační analýzy

S. P o š t a , M. K ř i v á n e k , M. Š i m k o v á , Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy :

Stanovení hafnia v zirkoniu a jeho slitinách aktivační analýzou

V. K a p i š o v s k ý , Výzkumný ústav energetický, Jaslovské Bohunice :

Vyhodnocování gama spektrů metodou štandardního píka

J. N o v o t n ý , V. V e s e l ý , Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy :

Dosavadní zkušenosti se spektrometrickým zařízením firmy Inter-technique FLURIMAT 20

V. H n a t o w i c z , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy:
Optimalizace lineárních filtrů používaných při zpracování spekter záření gama

J. F r á n a , A. M a š t a l k a , F. D u d a , V. F e i f r - l í k , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy :

Programy zpracování výsledků při IAA

Z. K o s i n a , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež u Prahy :

Zpracování spekter metodou nejmenších čtverců z hlediska systematických a statistických chyb

J. V l č e k , Krajská hygienická stanice, Hradec Králové, L. K o k t a , M. H o š p e s , P. N o v o t n á , Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů, Praha :

Praktické zkušenosti s některými metodami automatického zpracování spekter získaných polovodičovými detektory

J. D u d a , Geologický průzkum n.p., Ostrava :

Některé praktické poznatky z INAA a IGAA

M. K r á l í k , Laboratoř radiologické dozimetrie ČSAV, Praha:
Absolutní stanovení emise neutronů z radionuklidových zdrojů pomocí manganové lázně

Odborná skupina automatické spektrometrie

Odborná skupina rentgenospektrální analýzy

Dne 12. - 13.června 1974 se konalo ve Výzkumném a zkušebním ústavě v NHKG v Ostravě-Kunčicích společné zasedání obou skupin (2.pracovní schůze odborné skupiny automatické spektrometrie, 12.pracovní schůze odborné skupiny rentgenospektrální analýzy) spolu se zasedáním Komise pro spektrometrické normy.

Byly předneseny tyto přednášky :

Z. E r s e p k e , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava-Kunčice : Tavení nekovových materiálů pro rentgenovou fluorescenční analýzu.

Účelem tavení je homogenizace vzorku, odstranění vlivů granulometrického, mineralogického a krystalografického složení a snížení vlivů interelementárních. Tavenina musí být amorfní, sklovitá a pokud možno průhledná. Vzorek se musí dobře rozpouštět. Tavidlo nesmí narušovat kelímek ani působit těkání některých složek. Nesmí obsahovat určované prvky a musí mít vyhovující absorpční vlastnosti. Kelímek musí být nesmáčivý taveninou při teplotě tavení, odlévání i tuhnutí. Probrána různá obchodně dostupná tavidla a jejich vlastnosti. Plynové, muflové a vysokofrekvenční pece pro ruční i pro mechanizovanou seriovou výrobu perel. Výhody a nedostatky jednotlivých zařízení. Námi používané metody tavení cementových slinků, surovinových směsí, šamotů a aglomerátů.

Z. E r s e p k e , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava-Kunčice : Metody vyhodnocování při rentgenové fluorescenční analýze přetavených vzorků.

U tavicích a roztokových metod, kde jsou prakticky eliminovány granulometrické a mineralogické vlivy lze s výhodou uplatnit metody zředovací a metody přídavek.

Metody konstantních přídavek, metoda směrnice, případně metoda poměru směrnice (Wagner) umožňují snadný výpočet koncentrace určovaného prvku v neznámém vzorku a vylučují interelementární vliv.

Ještě výhodnější je Shermanova metoda dvojího ředění rozpracovaná dále Tertianem, která je podstatně méně pracná a umožňuje současné stanovení všech složek. Je však nutno empiricky zjišťovat pozadí.

Výše uvedené metody vyžadují minimální počet standardů případně se obejdou bez nich vůbec.

Metoda Lucas Tooth and Pyne je jednou z nejpoužívanějších metod empirické početní eliminace meziprvkových ovlivnění. Oproti shora uvedeným metodám však vyžaduje velmi značného počtu normálů. Tento počet respektive minimální počet normálů

lů lze exaktně odvodit. Vzhledem ku empirickému charakteru je nutno používat tuto metodu obezřetně.

Výsledky, kterých se dosahuje při vlastním výpočtu koncentrací iterační metodou neodpovídají ani u téže sady normálů nikdy přesně výsledkům a odchylkám dosaženým při výpočtu ovlivňovacích koeficientů metodou nejmenších čtverců. Za jistých podmínek nemusí iterace vůbec konvergovat a výsledky mohou být fyzikálně nesmyslné.

Byly uvedeny příklady postupu LTP metodou v některých zvlášť ožehavých případech.

Odborná skupina lokální elektronové mikroanalýzy

14.pracovní schůze se konala dne 18.června 1974 v Národním technickém museu.

Schůzi řídil Ing.František Štorek.

Účastníci měli možnost prohlédnout si expozice NTM. K dopolední části programu byly pozváni i členové ostatních odborných skupin ČSSS.

Byly předneseny přednášky :

F. Š t o r e k , Výzkumný ústav hutnictví železa, Praha : Nové druhy přístrojů pro lokální mikroanalýzu.

Budící záření je obvykle fokusované do svazku. Druhy fokusovaného záření : fotony světelného záření, rtg záření, elektrony, ionty. Detekované signály používané pro lokální mikroanalýzu : světelné záření (laserové mikroanalýzátory), rtg záření (elektronové mikroanalýzátory), ionty (iontové mikroanalýzátory). Augerovy elektrony (Augerovy mikroanalýzátory).

J. G o u r n o t , CAMECA, Paříž : Iontové mikroanalýzátory, současný stav vývoje a jejich aplikace.

Princip : fokusovaný svazek primárních iontů (např. Ar) dopadá na analyzované místo vzorku a "vyráží" z ně-

ho přítomné atomy, které jsou potom v hmotovém magnetickém spektrometru analyzovány. Těmito přístroji je možno provádět jednak bodové i plošné analýzy povrchu (podobně jako při EMA) jednak analýzy hloubkové po postupném odleptávání povrchu do hloubek $1\ \mu\text{m}$ i více. Zvláště vhodný je iontový mikroanalýzátor pro analýzy lehkých prvků včetně vodíku, helia apod. a velmi nízkých koncentrací některých prvků. Je možno dobře rozlišit izotopy jednotlivých prvků. Možnosti aplikace jsou rozsáhlé - v jaderném výzkumu, metalurgii, biologii a j.

Skupina EMA a SEM při ČSSS připravila překlad a rozmnožení textu celé přednášky (11 stran).

Cena přístroje je řádově 300 000 US\$. Fa Cameca vyrobila cca 27 těchto přístrojů, fa ARL cca 12. Nejblížejší přístroj je ve sklářském výzkumném ústavu v Berlíně (NDR).

P. Gournot nabízí zdarma provedení některých analýz na přístroji v Paříži pro naše zájemce. Případní zájemci o přístroj se mohou obrátit přímo na firmu CAMECA nebo na prodejní zastupitelství fy SORICE. Skupina EMA a SEM dostane prospektový materiál, který zájemcům předá.

K. J u r e k , Geologický ústav ČSAV, Praha :
Výpočetní programy v elektronové mikroanalýze.

Skupina EMA a SEM připravila a rozdala svým členům seznam všech pracovišť v ČSSR, které používají programy pro výpočet prvních aproximací a korekcí. Na jedné straně je snaha po úplném odlehčení operátorů a obsluhy tak, aby výstupy z EMA byly použitelné do komputerů bez dalších úprav. To však znemožňuje do velké míry možnost průběžné kontroly a výsledků během analýzy, změny pracovních podmínek, opravných měření atd. Na druhé straně jednoduché programy potřebují mnoho lidské práce při vypisování vstupních dat.

V diskusi k přednášce se v podstatě formulovaly dva závěry :

- a) doporučuje se programy řešit ve dvou stupních; t.j. nejprve první aproximace a potom tyto použít jako vstup do počítače s programem pro korekce
- b) není zájem o společný univerzální program, který by používaly všechny laboratoře EMA v ČSSR. Je však účelné zajišťovat

vzájemnou informovanost o používaných programech v rámci skupiny EMA při ČSSS.

Informace :

1. V Brně vystavovala firma ISI (International Scientific Instruments) jednoduché malé řádkovací mikroskopy MINI-SEM; MINI-RAPID-SCAN; atd. Nejlevnější z přístrojů je model M-RS, který v kompletním vybavení stojí cca 25 000 DM. Servis pro tyto přístroje je nabízen z Vídně.

Adresa : OEWAG - INSTRUMENTATION

Seilerstätte 18 - 20

A - 1015 Wien

2. Ve Výzkumném ústavu anorganické chemie v Ústí nad Labem (dr.Jambor) bude od září 1974 po dobu cca 1/2 roku provozován pro demonstrační účely přístroj Philips P-SEM-500. Z přístrojů SEM je relativně nejdražší. Firma však slibuje vysokou spolehlivost a snadnou obsluhu. Skupina EMA a SEM je zvána, aby v prosinci 1974 uspořádala ve VÚAnCh mimořádnou pracovní schůzku (dr.Waňková).
3. Konference v Moskvě o EMA a SEM v červenci 1974 se zúčastní s. Hulínský, Jurek, Pavlíček, Václavíková.
4. Letní škola o EMA a SEM se uskuteční od 13.10.-18.10.1974 v hotelu Zvíkov ve Zvíkovském Podhradí.
5. Nedisperzní detektory EDAX jsou instalovány zatím na přístrojích SEM v SCNP Kladno a Tesla Rožnov. Je možno dobře provádět plošné obrazy při prouděch vzorkem řádově 10^{-10} A i nižších. Jejich prostorová rozlišovací schopnost je však stejná jako u přístrojů EMA.
6. Příští schůzka se doporučuje uskutečnit v lednu 1975 v n.p. Tesla Rožnov s tématem "Použití nedisperzních detektorů na přístrojích SEM". (dr.Ševčík)
Výhledově další schůzka na jaře 1975 v laboratoři Uranového průmyslu - Příbram (dr.Rost) s tématem "Univerzální nebo jednocelové přístroje EMA a SEM".
Další možností je schůzka v Ústavu jaderných paliv - Zbraslav s tématem "Malé přístroje SEM" (Ing.Pavlíček).



MOLEKULOVÁ SEKCE

Odborná skupina Mössbauerovy spektroskopie

5. pracovná schůze se konala dne 14. února 1974 na Elektrotechnickej fakulte SVŠT v Bratislave.

Schůzi řídil Ing. Jozef Sitek.

Na programu byly tyto přednášky :

M. Gregušková, Ústav experimentálnej farmakológie SAV, Bratislava : Niektoré príklady použitia Mössbauerovho efektu v biochemických analytických metódach.

Úlohou referátu bolo podať prehľadnú správu o možnostiach použitia metódy bezdrazovej jadrovej gama rezonancie pri štúdiu štruktúry biomolekúl a ich funkcie v živom organizme. Stručne boli zhodnotené existujúce podmienky experimentu, z ktorých je treba vychádzať : súčasný stupeň poznania molekulárnej a atomárnej štruktúry biomateriálov, výskyt a obsah pre Mössbauerovu spektroskopiu vhodných izotópov v biomateriáloch, fyziologická významnosť týchto izotópov, experimentálne podmienky nízkych teplôt, absorbovaných dávok gama žiarenia a vonkajších magnetických polí z hľadiska zachovania reprodukovateľných vlastností biomolekúl a možnosti interpretácie Mössbauerových spektier.

V ďalšej časti referátu boli uvedené jednak výsledky Mössbauerových spektier lyofilne vysušeného oxihemoglobínu pripraveného z arteriálnej krvi psa bez obohacovania izo-

tópom Fe^{57} , a spektrá tej istej látky po intravenóznom podaní účinnej chemickej substancie - josénu (alpha phyllocladan) v dávke 0,5 mg/kg váhy zvierata, s vyhodnotením závislosti doby účinku látky a identifikovaných zmien v parametroch spektier.

Zároveň boli uvedené Mössbauerove spektrá komplexných zlúčenín nukleozidov deoxyribonukleovej kyseliny se železom. Spektrá boli merané na vzorkách tenkých filmov týchto komplexov pri izbových teplotách a pri teplotách tekutého dusíka. V porovnaní výsledkov Mössbauerových spektier na prirodzených vzorkách, sme uviedli aj zmeny v týchto spektrách identifikované po dodatočnom ožarovaní komplexných zlúčenín UV žiarením v oblasti 280 - 320 nm.

J. Lipka, Katedra jadrovej fyziky a techniky EF SVŠT, Bratislava : Fázová analýza niektorých technologicky spracovaných surovín.

V príspevku boli rozobraté výsledky aplikácie Mössbauerovej spektroskopie pri fázovej analýze produktov tepelného rozkladu $FeSO_4 \cdot 7H_2O$ bez prístupu vzduchu. Merania boli uskutočnené v teplotnom rozsahu 20 až 800 °C. V tomto rozsahu teplôt bol sledovaný proces dehydratácie a jednotlivé produkty teplotného rozsahu.

V druhej časti boli zhrnuté výsledky fázovej analýzy surovej a redukovanej niklovej rudy. Zistilo sa, že surová ruda obsahuje železo vo forme hematitu ($\alpha - Fe_2O_3$). V redukovanej rude boli identifikované najmenej 5 rôznych slúčenín. Okrem magnetitu (Fe_3O_4), wustitu (FeO) a kovového železa ($\alpha - Fe$) tiež dva kvadrupóly, z ktorých jeden odpovedá dvoj a druhý trojmocnému železu. Tieto zložky sa však zatiaľ nepodarilo bližšie identifikovať.

M. Hucľ, Katedra jadrovej fyziky a techniky EF SVŠT, Bratislava : Poznámka k používaniu jednotiek v Mössbauerovej spektroskopii

Dodnes nie je v celosvetovom merítke zjednotená symbolika a používanie jednotiek v Mössbauerovej spektroskopii. S ohľadom na zjednotenie symboliky pre označovanie parametrov

a veličín a postupného prechodu na SI sústavu bol prednesený návrh na označovanie používaných znakov a ich jednotiek. Pri návrhu sme vychádzali z posledného vydania Mössbauer Effect Data Index, ktoré odporúča jednotky SI. Pre všetky navrhnuté parametre je možné nájsť jednoznačné symboly i s príslušnými jednotkami. Vzhľadom na SI sústavu však dochádza k diskutabilnej otázke pri použití symbolu i jednotky pre doteraz označované H_{ef} - hyperjemné magnetické pole (v doteraz používanej CGSem sústave boli vo svetovej literatúre používané rovnakým dielom oerstedy i gaussy). Otázka tohto znaku a jednotky bude diskutovaná na jednej z ďalších schôdzok. Po diskusii bolo odporúčané používanie znakov a jednotiek pre všetky pracoviská v oblasti Mössbauerovej spektroskopie v ČSSR.

6. pracovní schůze (seminář) se konala ve dnech 6. - 7. května 1974 v rekreačním středisku SVŠT v Kálcnici. Seminář řídil Ing. Jozef Sitek.

Semináře se zúčastnili zástupci většiny pracovišť v ČSSR, kde se zabývají Mössbauerovou spektroskopií. Odborná skupina projednala a doporučila jednotné používání symbolů a jednotek v Mössbauerově spektroskopii.

Byly předneseny přednášky :

J. P o l á k o v á , Ústav fyzikální metalurgie ČSAV, Brno : Studium uspořádání slitiny Ni_3Fe

Na základě studia magnetických vlastností tuhých roztoků FeNi v souvislosti s atomovým uspořádáním typu Ni_3Fe /1, 2/ jsme přistoupili, použitím metody Mössbauerova jevu, k podrobnému studiu uspořádání na krátkou vzdálenost vzorku Fe 74,6 at.% Ni, jehož koncentrace je velmi blízká stechiometrickému složení.

Naměřená spektra jsou superposicí dvou až tří feromagnetických sextetů. Projevuje se tak citlivost rezonujícího jádra Fe^{57} na lokální okolí, které charakterisujeme středním počtem atomů niklu \bar{n}_{Ni} v 1. koordináční sféře mössbauerov-

ského atomu Fe^{57} . Přecházíme tedy k závislostem parametrů hyperjemné struktury na \bar{n}_{Ni} . Relativní absorpční plochy, příslušné jednotlivým sextetům, pak charakterizují množství atomů Fe^{57} s určitým lokálním okolím.

Studiem distribuce efektívnych polí, representovaných hodnotami magnetických štěpení $g_0(\bar{n}_{Ni})$ jsme získali kvalitativní poznatky o procesu uspořádání. Sextety s nižším $g_0(\bar{n}_{Ni})$ a vyšším relativním zastoupením jsou vytvářeny resonancemi jader Fe^{57} , která mají v 1. koordináční sféře 12 až 9 atomů Ni. S rostoucí teplotou žíhání vzorku klesá relativní zastoupení této komponenty a její hodnota $g_0(\bar{n}_{Ni})$ vzrůstá. Snižuje se tedy výskyt těch konfigurací, které mají vysoký počet atomů Ni v 1. koordináční sféře Fe^{57} , což je v souladu s představou o klesajícím stupni uspořádání na krátkou vzdálenost. Analogické úvahy lze provést pro zbyvající méně intenzivní sextety.

Při kvantitativním vyhodnocení byly pravděpodobnosti $P_{Fe}(n_{Ni})$ výskytu konfigurace s n_{Ni} atomy Ni a n_{Fe} atomy Fe v 1. koordináční sféře Fe^{57} počítány podle vztahu

$$P_{Fe}(n_{Ni}) = \frac{N!}{n_{Ni}! n_{Fe}!} [x_{Ni}(1+k\sigma)]^{n_{Ni}} [x_{Fe}(1+k'\sigma)]^{n_{Fe}},$$

kde $N = 12$ je koordináční číslo fcc mřížky, x_{Ni} a x_{Fe} jsou příslušné koncentrace. Výraz $x_{Ni}(1+k\sigma)$ vyjadřuje pravděpodobnost obsazení atomové polohy atomem Ni v 1. koordináční sféře Fe^{57} , charakterizujeme-li stav uspořádání parametrem σ . Analogicky výraz $x_{Fe}(1+k'\sigma)$ se vztahuje k obsazení atomové polohy atomem Fe.

Srovnáním $g_{0,\sigma}$, vypočtených podle vztahu

$$g_{0,\sigma} = \sum_{n_{Ni}=0}^{12} P_{\sigma,Fe}(n_{Ni}) \times g_0(n_{Ni})$$

s experimentálními hodnotami \bar{g}_0 , získanými z distribuce $\bar{g}_0(\bar{n}_{Ni})$ byly stanoveny hodnoty σ , charakterizující stupeň uspořádání na krátkou vzdálenost. V oblasti kritické teploty byl zjištěn prudší pokles σ na hodnotu, která při dalším růstu teploty pozvolna klesá, což odpovídá představě, že i při nadkritických

teplotách existuje více správných párů Fe-Ni než odpovídá jejich náhodnému počtu při dokonalé neuspořádanosti.

- /1/ Poláková J., Lauermannová J., Zemčík T.: Proc.Int.Conf. Magnetism, Moskva 1973 (v tisku)
 /2/ Poláková J., Lauermannová J., Zemčík T.: Proc. 5-th Int. Conf.Mössbauer Spectrometry, Bratislava 1973 (v tisku)

T. Z e m č í k , Ústav fyzikální metalurgie ČSAV, Brno : Strukturní změny ve slitinách Fe-Si a Fe-Mn.

V ÚFM ČSAV byl metodou Mössbauerovy spektroskopie studován systém Fe-Si v oblasti bohaté železem i křemíkem (motivováno aplikacemi ve výrobě křemíkových trafoocelí a v polovodičové technice) a Fe-Mn v oblasti bohaté železem (base paramagnetických ocelí).

Měřením teplotní závislosti parametrů mössbauerovských spekter slitiny Fe-13,2 at.% Si do 700 °C byla potvrzena koexistence paramagnetické a feromagnetické fáze v okolí 550°C v důsledku spinodální dekompozice a zjištěna existence uspořádání typu DO₃ (Fe₃Si) za pokojové teploty. Ve slitinách s vyšší koncentrací křemíku byly rozlišeny kvadrupólové dublety intermetalických sloučenin FeSi, α-FeSi₂ a β-FeSi₂. Získaných údajů bylo použito při interpretaci mössbauerovských spekter vzorků připravených difusí Fe⁵⁷ do křemíku a prokázána přítomnost Fe³⁺ v tuhém roztoku (na hranici měřitelnosti ve vzorku zakaleném z teploty 1300 °C odpovídající maximu rozpustnosti Fe v Si).

Systém Fe-Mn je studován z hlediska martensitické transformace γ-α a poměru obsahů paramagnetických a feromagnetických fází v oblasti do 18 % Mn s těžištěm v okolí 12 % Mn. Byl sledován zejména vliv plastické deformace iniciující uvedenou transformaci a její teplotní hysterese.

Závěrem byl diskutován výhled prací na slitinách Fe-Si a Fe-Mn z hlediska aplikovatelnosti metody Mössbauerovy spektroskopie.

J. L a u e r m a n n o v á , Podnik výpočetní techniky, Brno : Měření martensitické soustavy Fe-Ni-C.

Příspěvek shrnuje dosavadní výsledky získané z mössbauerovských spekter slitin Fe-Ni-C s odstupňovaným obsahem niklu do 25 váh % a uhlíku do 1,8 váh % kalených na dusíkovou teplotu a při této teplotě měřených jako absorbéry.

Z hyperjemné struktury zeemanovské štěpené složky spektra odpovídající martensitické fázi ve vzorcích byla stanovena střední efektivní pole na jádře Fe⁵⁷ v závislosti na obsahu niklu a uhlíku. Na základě předpokládané úměrnosti mezi velikostí efektivního pole a magnetického momentu železa μ_{Fe} ve slitině Fe-Ni byl počítán μ_{Fe} v závislosti na obsahu niklu.

U spekter vzorků s vyšší koncentrací legujících prvků byla hyperjemná struktura hodnocena z hlediska distribuce atomů niklu. Z rozkladů do dvou šestičarových komponent byla určena pro každou koncentraci Ni dvě efektivní pole na jádrech Fe⁵⁷ s různým obsazením 1.koordináční sféry niklovými atomy a závislosti těchto polí na obsahu uhlíku.

Naměřené závislosti byly kvalitativně vysvětleny na základě navrženého průběhu magnetického momentu železa v martensitické soustavě Fe-Ni-C.

Relativní množství zbytkového austenitu > 1 % bylo určováno z podílu střední čáry ve spektrech odpovídající této fázi. Potvrdilo se, že jeho výskyt je vázán na existenci deskového martensitu.

K. R a c l a v s k ý , Katedra geologie a mineralogie VŠB, Ostrava, T. Z e m č í k , Ústav fyzikální metalurgie ČSAV, Brno : Mössbauerova spektroskopie lunárních materiálů.

Mössbauerova spektroskopie je jednou z nejvýznamnějších jaderně fyzikálních metod studia lunárních materiálů. Mössbauerův jev na jádrech Fe-57 poskytuje cenné informace o distribuci a krystalochemii železa jako významného kosmochemického prvku v jednotlivých minerálních fázích lunárních hornin a regolitu. Tyto materiály, dopravené na Zem v rámci projektů

APOLLO a letů automatických stanic LUNA byly studovány řadou skupin. Čtyři skupiny v USA a dvě britské prováděly komplexní studium lunárních materiálů, jejich fázovou analýzu a detailní výzkum jednotlivých minerálů (ilmenit, pyroxeny, olivin, sklo, metalické železo, troilit). Vzorky LUNA jsou touto metodou průběžně intenzivně studovány v Ústavu geochemie AV SSSR v Moskvě, kde byly vedle celkové analýzy sledovány zejména olivíny a kovové železo. O dalším měření je referováno z MLR; v ČSSR jsou naše mössbauerovská měření součástí komplexního výzkumu sovětských vzorků z LUNY-16 a LUNY-20, věnovaných sovětskou akademií věd.

Vedle srovnání celkové fázové analýzy s publikovanými daty je hlavním cílem tohoto výzkumu rozlišení co nejvyššího počtu složek (minerálů a poloh železa), detailní studium kovové fáze a spektroskopie vybraných jednotlivých částic regolitu. Transmisní technikou byly studovány cca 100 mg vzorky nejjemnější zrnitosti i průměrného složení a pro měření cca 10 µg izolovaných zrn bylo použito speciální uspořádání. V mössbauerovských spektrech bylo rozlišeno až šest kvadrupólových dubletů železa v silikátech a oxidech. Z velikosti magnetického štěpení sextetu kovového železa byl zjištěn stupeň jeho legování niklem (cca 1,5 %). Výsledky jak našich, tak publikovaných měření potvrzují význam Mössbauerovy spektroskopie a její perspektivnost pro poznání lunárních hornin a extraterrestrických materiálů vůbec.

F. J a n á k , K. Z a p l e t a l , Geofyzika n.p.
Brno : Mössbauerova spektra feromagnetických minerálů.

V referátu se pojednává o souvislostech mezi magnetickými vlastnostmi a Mössbauerovými spektry tzv. feromagnetických minerálů. Do obecného názvu feromagnetické minerály jsou zahrnuty ty minerály, v jejichž struktuře existují samovolně zmagnetované magnetické podmřížky (jedna nebo více). Tyto minerály jsou rozděleny na kovy (popř. slitiny), kysličníky a sirníky.

Ve skupině kysličníků železa jsou diskutována především Mössbauerova spektra nestechiometrických magnetitů. Je

uveden postup použitý při matematickém zpracování těchto spekter. Ve spektrech je rozlišeno dvanáct čar.

Hlavní pozornost je věnována výsledkům měření fyzikálních vlastností na přírodních sirnicích železa, pyrrhotitech. Pro jejich studium je použito komplexu metod. Pomocí metody práškových obrazců, metody elektronové mikrosondy, termomagnetické analýzy a Mössbauerovy spektrometrie jsou studovány jednotlivé magnetické fáze přírodních pyrrhotinů a také pyrrhotiny, které se skládají z několika mikroskopicky prorostlých magnetických fází. Ukazuje se, že každá ze dvou základních magnetických fází (antiferomagnetická a ferimagnetická) vytváří Mössbauerovo spektrum jednoho typu (až 24-čarové). Na základě studia pomocí Mössbauerovy spektrometrie lze chápat přírodní pyrrhotiny jako směs těchto základních fází.

K. V o l e n í k , Státní výzkumný ústav ochrany materiálu, Praha : Analýza produktů oxidace nízkouhlíkové oceli

Mössbauerova spektroskopie přináší některé nové informace o složení a struktuře kysličníkových vrstev na ocelích v porovnání s výsledky tradičních metod (zejména difrakčních metod a metalografie). Současná práce byla zaměřena na aplikaci Mössbauerovy spektroskopie při výzkumu složení a struktury kysličníkových vrstev na nízkouhlíkové oceli. Tyto vrstvy jsou složeny prakticky jen z čistých kysličníků železa, takže jde o jednodušší případ než u kysličníkových vrstev na legovaných ocelích. Byly měřeny celkem 3 serie preparátů :

1. masivní zoxidované vzorky bez jakéhokoli zásahu do vrstvy, měření bylo prováděno rozptylovou metodou;
2. vrstvy sejmuté ze základního materiálu podleptáním, výjimečně i mechanicky, měření bylo prováděno transmisní metodou;
3. pro porovnání reálných vrstev s kysličníky přesně definovaného složení byla proměřena transmisní metodou serie synteticky připravených práškovitých kysličníků (šlo zejména o stechiometrický i nestechiometrický magnetit).

Měření Mössbauerových spekter bylo prováděno na Katedře jadrové fyziky a techniky SVŠT v Bratislavě. Kromě toho pro porov-

nání s tradičnými metodami byly vzorky proměřeny i rentgenograficky ve SVÚOM Praha.

Výsledky měření ukazují, že v rozptylových Mössbauerových spektrech kysličnických vrstev ve styku se základním materiálem převládá spektrum základního materiálu až do tloušťky vrstvy kolem 10/um. Rozptylová metoda je vhodná pro kvalitativní identifikaci fází přítomných ve vrstvě.

Transmisní spektra vrstev sejmutých ze základního materiálu jsou v zásadě vhodná i pro kvantitativní fázovou analýzu vrstev, je však třeba dořešit některé problémy početního zpracování spekter. Nevýhodou je nutnost použít ve většině případů podleptávací metodu k separování vrstvy od základního materiálu, čímž dochází k extrakci cementitu ze základního materiálu, takže Mössbauerovo spektrum výsledného produktu je superpozicí spekter kysličníků železa a Fe_3C .

Měření synteticky připravených vzorků magnetitu byla ověřena velká citlivost Mössbauerovy spektroskopie na odchylku magnetitu od stechiometrie, a to zejména v porovnání s jinými metodami, zvláště s rentgenografickým měřením mřížkové konstanty. Byly získány kvantitativní údaje o závislosti poměru intenzit dvou dílčích sextetů, z nichž je složeno spektrum magnetitu, na odchylce od stechiometrie.

B. Ž i t ň a n s k ý , Výskumný ústav zvaračský, Bratislava, M. P r e j s a , I. T o t h , Katedra jadrovej fyziky a techniky SVŠT, Bratislava : Stanovenie delta feritu v Cr-Ni oceliach efektom Mössbauera.

Deltaferitom je nazývaná magnetická fáza vysoko-
legovaných Cr-Ni ocelí, kde v PC kryštalickej mriežke železa je značná časť atómov Fe substituovaná Cr, Ni a pod. Delta ferit sa bežne určuje magnetometricky (vážením). Pre štúdium prítomnosti delta feritu vo zvarových kovoch boli vyhotovené modelové etalóny práškového Fe v práškovej Cu - vylisované špeciálnou technikou. Pomocou týchto etalónov bola vyhotovená kalibračná krivka : závislosť veľkosti plochy MS na koncentrácii alfa feritu. Nebol problém zmerať ešte 1% feritu. Podľa techniky merania MS na daných etalónoch (odrazová metóda) boli

merané rozne vzorky s obsahom delta feritu od asi 20% do asi 3%. Na MS sa viditeľne nepodarilo objaviť viac než jednu paramagnetickú čiaru. Ani 16% delta feritu zreteľne nevnašalo do priebehu MS anomálie tj. zmeny, ktoré by mohli byť pripísané prítomnému delta feritu. Tomuto prekvapivému efektu autori venovali značnú pozornosť.

Jediná práca, zameraná na aplikáciu MS pre identifikáciu delta feritu vyšla v januári 1974 (Welding Journal Jan.1974 p.s-1 až s-13). Päťčlenný kolektív robil tiež merania sigma fáze. MS ani v ich práci neodrážali zreteľne viditeľnú prítomnosť delta feritu. Hodnoty však zverili počítaču (Lorentzovský priebeh pre paramagnetickú čiaru, Gausovský pre feromagnetický sextet). Použitím vhodných korekčných faktorov dosiahli pomerne dobrý súhlas závislosti plochy MS a konc. delta feritu. Pri jeho vyšších koncentraciách MS vykazovali relatívne menšie hodnoty.

Aplikácii MS pre identifikáciu delta feritu ešte treba venovať zvýšenú pozornosť a to pre dôležitosť tejto fáze samotnej.

M. H u c l , Katedra jadrovej fyziky a techniky SVŠT, Bratislava : Poznámka k používaniu jednotiek a symbolov v Mössbauerovej spektroskopii

Veľmi široké použitie Mössbauerovej spektroskopie v najrôznejších oblastiach (fyzika, chémia, metalurgia, mineralógia, geológia, medicína atď.) viedlo k tomu, že označovanie jednotlivých parametrov, symbolov a rozmerov jednotiek, sú v odbornej literatúre veľmi rôznorodé. V snahe zjednotiť symboly a jednotky pristúpila naša odborná skupina k diskusii o najvhodnejšie označovanie a používanie jednotiek na základe SI sústavy.

Na predchádzajúcom seminári boli prijaté našou odbornou skupinou symboly a jednotky väčšiny parametrov. Vzhľadom na veľmi širokú diskusiu bolo rozhodnutie o doporučení odložené na ďalšie zasadnutie. Na tomto zasadnutí bolo odporúčané pridržať sa návrhu Ad Hoc Panel on Mössbauer Data a Numerical Data Advisory Board, ktorý bol postúpený na posúdenie na

Commission on Molecular Structure and Spectroscopy, IUPAC.

Všetkým pracoviskám v ČSSR doporučame, aby sa pri-
držovali tohto návrhu na používanie symbolov a jednotiek
v Mössbauerovej spektroskopii.

Návrh na používanie symbolov a jednotiek
v Mössbauerovej spektroskopii

Názov	Symbol	SI jednotka	Navrhovaná jednotka
Izomérny posun	δ	ms ⁻¹	mms ⁻¹
Kvadrupólová väzbová konštanta	$\frac{e^2qQ}{h}$	Hz	MHz
Parameter asymetrie	η		
Kvadrupólové rozštiepenie	Δ	ms ⁻¹	mms ⁻¹
Šírka čiary	Γ_{exp}	ms ⁻¹	mms ⁻¹
Prirodzená šírka čiary	Γ_{nat}	ms ⁻¹	mms ⁻¹
Hodnota efektu	ϵ		
f-faktor	f		
Efektívna hrúbka	t		
Účinný prierez	σ_0	m ²	m ²
Intenzita vnútorného magnetického pola	H_{int}	Am ⁻¹	Am ⁻¹
Intenzita vonkajšieho magnetického pola	H_{ext}	Am ⁻¹	Am ⁻¹
Gradient elektrického pola		Vm ⁻²	Vm ⁻²
Hlavná zložka gradientu elektrického pola	V_{zz}	Vm ⁻²	Vm ⁻²
Kvadrupólový moment	eQ	Cm ⁻²	Cm ⁻²
Vibračná anizotropia	ϵ_m		
Asymetria intenzity (Gořdanski-Karjaginov efekt)	A		

Poznámka : pri rozlišovaní parametrov zdroja a absorbátora
označovať parametre zdroja indexom s a absorbátora
indexom a

Odborná skupina spektroskopie pevného stavu

6.pracovní schůze se konala dne 28.května 1974
na Katedře elektrotechnické fakulty ČVUT v Praze.
Schůzi řídil Dr.Antonín Vaško DrSc.

Byly předneseny přednášky :

A. V a š k o , Ústav radiotechniky a elektroniky
ČSAV, Praha : Síťkové polarizátory pro celý infračervený obor

Úvodem byla podána stručná zmínka o historii stu-
dia polarizačního účinku elektromagnetických vln drátovými
síťkami od jeho objevu Hertzem a dále o jeho ověření Rubensem
i pro velmi vzdálený infračervený obor. Teprve v posledních
létech se opět začalo s přípravou polarizátorů pro blízký a
střední infračervený obor; vzhledem k nutným malým tloušťkám
drátků a malé mřížkové konstantě se přešlo na mřížky ryté na
různé propustné podkladní vrstvy a k pokovování stěn vrypů.
Autor užil místo rytí fotolytografickou techniku; nejmenší
mřížkovou konstantu a sinusový tvar vrypů dosáhl vytvořením
rovnoběžných interferenčních proužků dvou koherentních svazků
Kr-laseru. Jsou uvedeny charakteristické parametry polarizáto-
rů tohoto typu, komerčně vyráběných, pro vlnový obor od 2 do
1000 μ m.

Z. C u c h ý , Monokrystaly, Turnov : Polarizáto-
ry a jejich použití v polarizační spektroskopii

Pomocí polarizátorů zjišťujeme ve spektroskopii
anisotropní absorpci látek, jejich dichroismus je charakteri-
zován dichroidním poměrem. Ten může být stanoven s různými ne-
přesnostmi způsobenými např. nedokonalostí polarizátorů, vysou-
skou konvergencí svazku a nežádoucí polarizací svazku na dal-
ších optických členech soustavy. Tyto chyby byly analyzovány
Charneyem, Woodem a Mitrou a provedené analýzy umožňují prová-
dět korekce naměřených výsledků. Široký kvalitativní a kvanti-
tativní rozbor polarizačních měření na krystalech podal Hell-
wege, podle jeho rozboru můžeme stanovit podle krystalových

tříd možnosti jednoduchého určení polohy elementárního zdroje (zářiče) - dipólu, určení síly oscilátoru v klasickém podání teorie polarizačního záření.

Nejdříve jsou probrány možnosti konstrukce polarizátorů v extrémní ultrafialové oblasti 1200 až 2000 Å.

Polarizační měření v ultrafialové, viditelné a blízké infračervené oblasti umožňuje vlastní konstrukce univerzálního vápencového polarizátoru.

Je učiněna zmínka o speciálních úpravách hranolových polarizátorů se zaměřením na využití v laserové technice a holografii. Pozornost je též věnována stále většímu využívání polarizačních filtrů.

V infračervené oblasti spektra od 1 - 20/μm zajišťuje potřebu polarizátorů naše konstrukce destičkového AgCl polarizátoru, nově se začínají využívat mřížkové polarizátory. Pro spektroskopii v daleké infračervené oblasti jsou vhodné transmisní destičkové polarizátory s Ge, Se a hlavně z polyethylenu.

Nakonec je uveden polarizátor využívající vysokého dichroismu u pyrolitického grafitu pro oblast nad 10/μm.

Odborná skupina hmotové spektrometrie

5. pracovní schůze se konala dne 11. června 1974 v Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV v Praze. Schůzi řídil Dr. Zdeněk Herman CSc.

Byly předneseny přednášky :

J. H. F u t r e l l , University of Utah, Salt Lake City, Utah, USA : Chemická ionizace

Metoda chemické ionizace, která je v hmotové spektrometrii stále více používána, využívá reakcí iontů s molekulami k analytickým účelům. V iontovém zdroji hmotového spektrometru je za tlaku asi 1 Torr ionizována elektrony směs nadbytku základního plynu (metan, 1-butan, vodní pára) a malého množ-

ství zkoumané látky; z iontů základního plynu vzniknou rychle iontové produkty (CH_5^+ , C_2H_5^+ , H_3O^+), které jsou vlastním ionizačním agens pro molekuly zkoumané látky. Chemickými reakcemi přenosu protonu, hydrodového iontu, atomu H, přenosu náboje a v kondenzačních reakcích vzniká tak jednoduché, charakteristické spektrum sledované látky, které má řadu výhod ve srovnání s hmotovým spektrem vzniklým nárazem elektronů. Spektra chemické ionizace mají stále větší význam v oblasti aplikace hmotové spektrometrie v organické chemii a biochemii při určování struktury látek.

J. H. F u t r e l l , University of Utah, Salt Lake City, Utah, USA : Iontová cyklotronová resonance

Iontová cyklotronová resonance patří mezi nové speciální neklasické techniky hmotové spektrometrie. Využívá uvedení iontů (vzniklých nárazem elektronů) na kruhový orbit v silném magnetickém poli, charakterizovaný rezonanční frekvencí; s rezonancí spojená absorpce vysokofrekvenčního pole se používá k určení hmotového čísla. Metoda nachází časté použití při sledování srážkových procesů.

Odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie

Dne 20. června 1974 se konala na přírodovědecké fakultě University J. E. Purkyně v Brně ustavující schůze odborné skupiny magnetické rezonanční spektroskopie za přítomnosti 36 účastníků.

Ustavující schůzi předcházela schůze přípravné komise, která doporučila ustavení společné skupiny magnetické rezonanční spektroskopie s tím, že pracovní schůze budou vždy monotematické se zaměřením na NMR či EPR. Jako vedoucí odborné skupiny byl navržen doc. dr. Ing. Jaro Komenda CSc z přírodovědecké fakulty UJEP v Brně.

Činnost skupiny bude zaměřena takto :

1. Pracovní schůze celodenní, na nichž bude přednesena řada

- přednášek a to vždy buď z oboru NMR či EPR spektroskopie.
2. Budou organizovány letní školy.
 3. Budou organizovány vícedenní konference či sympozia, navazující na již dříve konaná sympozia o magnetické resonanci.

Byly předneseny přednášky :

M. N a v r á t i l , Výzkumný ústav makromolekulární chemie, Brno : NMR spektra polymerů s vysokým rozlišením.

Studium polymerů metodou nukleární magnetické resonance lze v podstatě rozdělit na dvě části :

1. měření jaderné relaxace pulsními metodami nebo přímé sledování širokopásmových spekter
2. NMR spektra s vysokým rozlišením

V prvním případě jsou polymery sledovány v pevném stavu a získané informace se především týkají morfologie a pohybu molekul. V druhém případě se polymery uvádějí do roztoku a studium je zaměřeno na objasňování struktury a stechiometrie polymerních řetězců. Získané spektrální čáry jsou však podstatně širší než u látek nízkomolekulárních. Polymer nelze považovat za chemické individuum neboť již při vlastní tvorbě polymeru mohou vznikat rozdíly v typu adice, takže se objevují rozdílné úseky polymerního řetězce. Přítomnost asymetrických uhlíků způsobuje rozdíly ve sterickém uspořádání jednotlivých segmentů. Nelze opomenout i rozdíly v důsledku konformačního uspořádání i u tak chemicky homogenního polymeru jako je např. polyethylen.

NMR spektra polymerů mají tedy své specifické zvláštnosti a chemický posun protonů je u nich vždy určován strukturou několika nejbližších monomerních jednotek. Pomocí NMR spektroskopie lze v oblasti polymerů určovat chemické struktury polymerů a kopolymerů a provádět konformační analýzu ve smyslu trans a gauche sekvencí. Jedná se o obdobnou analýzu jako u nízkomolekulárních látek. Největší přínos však znamená tato metoda pro měření stereoregularity polymerů. Jako úspěšný příklad této analýzy lze uvést NMR spektrum polymethylmethakrylátu. Zjednodušující postupy lze názorně aplikovat např. na polyvinylchlorid.

V. Š i m á n e k , A. K l á s e k , Chemický ústav lékařské fakulty University Palackého, Olomouc : Studium struktury makových alkaloidů pomocí NMR.

V přednášce bylo ukázáno použití NMR spektroskopie při řešení struktur některých nových alkaloidů izolovaných z rostlin rodu Papaver a jejich transformačních produktů. Dále byly diskutovány možné konformace těchto látek na základě analýsy NMR spekter.

M. V i d a , Chemicko-technologická fakulta SVŠT, Bratislava : On-line analýza NMR spektier.

V přednášce byla diskutovaná otázka automatickej analýzy NMR spektier, jej súčasné možnosti a perspektívy. On-line spojenie NMR spektrometer - počítač, poskytuje reálnu možnosť aspoň čiastočného riešenia uvedeného problému najmä pri využívaní techniky Fourierových transformácií spektier, snímaných v impulznom režime.

Podrobne bola rozoberaná možnosť vytvorenia programového systému. Jestvujúce možnosti boli dokumentované na príklade komplexného programového systému CPS-2, používaného na analýzu NMR spektier spinového systému AA'BB'.



Rámcový plán odborných akcí většího rozsahu
na rok 1975

Atomová sekce

19. pracovní schůze

"Současný stav a perspektivy vývoje spektrochemických analytických metod v ČSSR" - spojená se schůzemi některých odborných skupin

(Ostrava, březen 1975, 3 dny)

20. pracovní schůze

"Spektrochemický analytický proces z hlediska vztahu mezi analytickým vzorkem a referenčním materiálem" - spojená se schůzemi některých odborných skupin

(Plzeň, říjen 1975, 3 dny)

Kurz základů spektrochemické emisní analýzy

Kurz bude uspořádán ve dvou fázích, v první bude probrán teoreticko-experimentální základ emisní spektrální analýzy, v druhé budou praktická cvičení ve zvoleném oboru. Kurz bude ukončen zkouškami a účastníkům bude vydáno vysvědčení.

(Praha, červen, listopad 1975, po pěti dnech)

Seminář k odborné přípravě čs. pracovníků na XX. C.S.I.

Budou probráný a ověřeny názory a návrhy na organizaci odborné činnosti C.S.I.

(Praha, listopad 1975, 2 dny)

OS spektroskopie kovů (Ing. O. Staňková)

Kurz : Aplikace matematicko-statistických metod ve spektrochemické analýze (II. běh)

(Jánské Lázně, duben 1975, 5 dnů)

OS plamenové spektroskopie (Dr. I. Rubeška CSc)

a) Seminář o problematice rozvoje analytických metod plamenové spektroskopie

(Zvíkov, květen 1975, 4 dny)

- b) Pracovní schůze k aktuálním problémům plamenové spektrální analýzy
(Plzeň, říjen 1975)
- c) Výstava přístrojů fy. Perkin-Elmer a Varian-Techtron, spojená s praktickým cvičením na přístrojích
(Praha, III. čtvrtletí 1975, 3 dny)

OS rentgenospektrální analýzy (Dr. J. Waňková CSc)

- a) Pracovní schůze skupiny v rámci pracovních schůzí AS
(Plzeň, březen a říjen 1975, po 1 dnu)
- b) Seminář pro pokročilé pracovníky v oboru rentgenospektrální analýzy. Pokračování základního semináře z roku 1973 se specializovanou tematikou
(Zvíkov, září 1975, 5 dní)

OS lokální elektronové mikroanalýzy (Ing. F. Štorek)

Pracovní schůze skupiny v rámci pracovních schůzí AS
(Plzeň, březen a říjen 1975, po 1 dnu)

OS spektroskopie nevodivých materiálů (Ing. K. Flórián)

- a) Symposium "Použití statistiky a výpočetní techniky v emisní spektroskopii"
(Hrabušice, leden 1975, 5 dnů)
- b) Pracovní schůze na téma "Stopová analýza - čisté látky"
(Brno, duben 1975, 2 dny)
- c) Pracovní schůze věnovaná otázkám přípravy standardů a porovnávacích vzorků
(Košice, říjen 1975, 2 dny)

OS instrumentálních radioanalytických metod (Ing. M. Vobecký CSc)

- a) Pracovní schůze skupiny zaměřená na aktuální otázky rozvoje radioanalytických metod
(Praha, říjen 1975, 1 den)
- b) Seminář o instrumentální aktivační analýze. (Navazuje na seminář z roku 1973, tematika speciálnější)
(Třeboň, červen 1975, 5 dnů)

OS automatické spektrometrie (Ing.K.Kuboň)

- a) Pracovní schůze na téma "Automatická spektrometrická analýza šedé litiny"
(Ostrava, I.čtvrtletí 1975, 1 den)
- b) Pracovní schůze na téma "Automatická spektrometrická analýza feroslitin"
(Plzeň, říjen 1975, 1 den)

OS laserové mikroanalýzy (Ing.J.Jánošíková)

- a) Pracovní schůze na téma "Vliv parametrů laserových mikroanalýzátorů na strukturní rozlišovací schopnost a přesnost analýzy"
(Ostrava, březen 1975, 1 den)
- b) Pracovní schůze na téma "Laserová mikroanalýza s dvojestupňovým buzením"
(Plzeň, říjen 1975, 1 den)

Molekulová sekceOS spektroskopie pevného stavu (Dr.A.Vaško DrSc)

2 pracovní schůze - témata nestanovena

OS hmotové spektrometrie (Dr.Z.Herman CSc)

2 pracovní schůze na téma "Organická analýza a využití hmotové spektrometrie v organické chemii"
(Praha, Bratislava, 1 den)

OS elektronové spektroskopie a fotochemie (Ing.M.Nepraš)

- a) 2 pracovní schůze - téma neurčeno
- b) Symposium o pokrocích v elektronové spektroskopii (2 dny)
- c) Seminář na téma "Objektivní měření barevnosti"
(Pardubice, II.čtvrtletí 1975, 1 den)

OS chemické spektroskopie (Ing.M.Pisárčik CSc)

Kurz měření vibračních spekter - pro středně-technické kádry
(Bratislava, březen 1975, 5 dnů)

Dne 30. června 1974 zemřel ve věku 50 let

Ing. Jaroslav P o l á č e k ,

člen a funkcionář bývalého Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze, zakládající člen a dlouholetý hospodář Čs.spektroskopické společnosti.

Nám, kteří jsme s ním úzce spolupracovali, způsobil jeho odchod velkou bolest.

Budiž čest jeho památce.

ZPRÁVY Z KOMISÍ

Přístrojová komise

N a v e t a , technické textilní potřeby
Jablonec nad Nisou (Z.Drlík)

zakoupí UV spektrograf QU 24 nebo Q 24 včetně generátoru jisker

F o t o c h e m a , n.p. Hradec Králové

žádá o zapůjčení či odprodej interferometru (ITR-2) či jiný,
na kterém by bylo možno proměřovat kapalně vzorky.

K r a j s k á h y g i e n i c k á s t a n i c e ,
xenobiochemické oddělení, Balbínova 821, Hradec Králové
Ing.E.Flocková, telefon 26034

zakoupí starší zachovalý křemenný spektrograf Q 24 s obloukovým generátorem ABR 3 a spektroprojektorem.

S t r o j í r e n s k ý z k u š e b n í ú s t a v v Brně,
pobočka v Jablonci nad Nisou (vedoucí úseku rozvoje Miroslav Farský)

žádá o informaci nebo o konkrétní pomoc při poruše obloukového generátoru typu PS 39 (příslušenství spektrografu KS 55, SSSR)
Informaci o tom, kde by bylo možno objednat opravu sdělte na výše uvedenou adresu.

G e o l o g i c k ý ú s t a v Dionýza Štúra
Mlýnská dolina, Bratislava

ponúka k odpredaju : meď spektrálne čisté - copper rods
5 mm diameter x 15 cm dĺžky v tyčkách
v množstve 450 kusov (sklad.číslo 4364)
jednot.cena 334,45 Kčs/10 ks

G e o i n d u s t r i a , n.p.
Praha 7, Komunardů 6

nabízí k odprodeji sovětský dvojprojektor DS-1 (r.1953)

Ú s t a v p r o v ý z k u m r u d ,
Modřanská 23, Praha 4 - Hodkovičky
hledá spektrálního analytika s praxí pro analýzu rud a produktů jejich úpravy. Pracoviště je vybaveno spektrografy QU 24 a PGS 2 a potřebnou vyhodnocovací technikou. Nástup možný ihned.
Informace u vedoucí analytického odboru Dr.E.Pavlíkové
(telefon číslo 461851-7, linka 363).



RECENZE

N.L.Alpert, W.E.Keiser a H.A.Szymanski :

IR - THEORY AND PRACTICE OF INFRARED SPECTROSCOPY

Plenum/Rosetta Edition, Plenum Press, New York 1970

Recenzovaná kniha představuje úvodní přehled všech oblastí infračervené spektroskopie. Obsahuje kapitoly o přístrojové technice (56 stran), příslušenství (12 stran), teoretických základech infračervené spektroskopie (107 stran), využití charakteristických skupinových frekvencí ve strukturální analýze (119 stran), kvantitativní analýze (19 stran), technice úpravy vzorků k měření (21 stran) a katalogizaci spekter (16 stran).

Kniha vznikla přepracováním prvního vydání z r. 1964 (za rozšíření autorského kolektivu). Jestliže před deseti lety bylo vydání obecné příručky o infračervené spektroskopii průkopnickým činem, nabízí se dnes řada publikací stejného charakteru ke srovnání, takže již spíše vynikají některé nedostatky.

V kapitole o přístrojích se Dr.Alpertovi z Perkin-Elmer Corp. podařilo vybrat materiál tak, aby zde byly probrány všechny konstrukční prvky v míře odpovídající jejich důležitosti a přístupnosti pro chemicky vzdělaného čtenáře. Bohužel je zde poměrně málo ilustrací; přitom názorný obrázek často řekne více než dlouhý odstavec slovního popisu. Táž výtka platí i kapitole o příslušenství. Nepříznivě se také projevuje rozdělení a oddělení kapitoly o přístrojích (kap.3) a kapitoly o

přípravě vzorků (kap.7).

V části o teoretických základech se vychází z rotačně-vibračního pásu; jsou podány výrazy pro energii rotoru a oscilátoru. U polyatomických molekul jsou souběžně zavedeny pojmy valenčních a deformačních vibrací a normálních vibrací (zde, podle našeho názoru chybně, označené jako "fundamentální vibrace"). Dále je zaveden pojem molekulární symetrie. Jsou vysvětleny prvky symetrie a podrobně popsány jednotlivé grupy operací symetrie (prvky, které obsahují, a označení a aktivitu normálních vibrací); tuto část doprovázejí velmi pěkné obrázky. Je uveden způsob výpočtu počtu a aktivity vibrací jednotlivých typů symetrie pro danou molekulu. Velmi podrobně je probráno rotačně-vibrační spektrum formaldehydu - dle našeho názoru až neúměrně podrobně vzhledem k úvodnímu charakteru knihy. V kapitole však není zmínka o normálně souřadnicové analýze z hlediska vztahu mezi silovými konstantami a vibračními frekvencemi. Kapitola se nám jeví jako nevyvážená a příliš popisná na úkor logického výkladu podstaty věci.

Nejlepší část knihy představuje kapitola o využití charakteristických skupinových frekvencí. Jednotlivé spektrální oblasti jsou zde probrány přehledně, s uvedením vlivů jednotlivých faktorů na polohy probíraných pásů. U složitějších případů je každý oddíl doplněn schématem těchto poloh a souhrnem, kde jsou tyto vlivy podány v přehledu. Tuto kapitolu lze doporučit každému, kdo chce vniknout do způsobu interpretace spekter organických molekul.

Zbývající kapitoly jsou rozsahem i zpracováním méně závažné. Kapitola o kvantitativní analýze ukazuje spíše na vlivy, které mohou nepříznivě ovlivnit výsledek analýzy. Naš čtenář má ovšem důkladnější zdroj v příručce Kösslerově.

Dnes, v roce 1974, lze nalézt řadu knih, ve kterých jsou jednotlivá témata zpracována s lepším pedagogickým přístupem nebo na druhé straně podrobněji. Pro pracovníky, kteří se již se základy infračervené spektroskopie seznámili, může ovšem kniha sloužit jako užitečné kompendium.



Vydává Československá spektroskopická společnost při ČSAV
se sídlem ve Výzkumném ústavu ČKD v Praze 9, Na Harfě 7
Za ČSSS zodpovídá dr. B. Moldan CSc
Redakce P. Vampolová. Redakční uzávěrka 30. června 1974
Pouze pro vnitřní potřebu.
