



Československá spektroskopická společnost

Bulletin

20

1975

Čs. spektroskopická spol.
při ČSAV
KNIHOVNA
Přírůst. č. 109

V období od 1.července 1974 do 5.prosince 1974 pořádala Čs.spektroskopická společnost při ČSAV tyto akce :
seminář "Racionalizace a rozvoj spektrochemických analytických metod" v Praze

III.mezinárodní seminář o infračervené spektroskopii vysokého rozlišení v Liblicích

6.pracovní schůzi odborné skupiny spektroskopie nevodivých materiálů v Košicích

letní školu "Vibrační spektroskopie krystalů" ve Zvíkovském Podhradí

8.pracovní schůzi odborné skupiny instrumentálních radioanalytických metod v Kolíně

letní školu "Elektronová mikroanalýza a řádkovací elektronová mikroskopie" ve Zvíkovském Podhradí

7.pracovní schůzi odborné skupiny spektroskopie nevodivých materiálů v Modre

2.pracovní schůzi odborné skupiny elektronové spektroskopie a fotochemie v Pardubicích

7.pracovní schůzi odborné skupiny Mössbauerovy spektroskopie v Brně

8.pracovní schůzi odborné skupiny plamenové spektroskopie v Praze

III.kurz automatické spektrometrie v Ostravě

12.pracovní schůzi odborné skupiny rentgenospektrální analýzy v Praze

2.pracovní schůzi odborné skupiny magnetické rezonanční spektroskopie v Brně

6.pracovní schůzi odborné skupiny hmotové spektrometrie v Praze

18.zasedání hlavního výboru Čs.spektroskopické společnosti
slavnostní valné shromáždění k 25.výročí organizované spektroskopie

Dne 4.prosince 1974 se konalo v Národním technickém muzeu v Praze 18.zasedání hlavního výboru. Schůzi zahájil v 9 hodin Dr.J.Kuba a řídil celý její průběh.

Z programu uvádíme :

Dr.Mráz podal zprávu o plnění socialistického závazku, který byl k 30.výročí osvobození Československa rozšířen o osobní závazky členů hlavního výboru. Socialistický závazek bude 4.12.1974 předán akademiku Kožešníkovvi.

Zprávu o činnosti předsednictva uvedl Dr.Moldan. Uvádíme z ní : Byla ustavena komise pro výpočetní metody (pod vedením Ing.V.Svobody) a komise pro standardy a referenční materiály (pod vedením Ing.K.Bičovského). Pod vedením doc.J.Komendy začala pracovat odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie.

Ve zprávě o přípravách na XX.C.S.I. (Colloquium Spectroscopicum Internationale) a 7.I.C.A.S (International Conference on Atomic Spectroscopy) oznámil Dr.Rubeška, že pořádání kolokvia bylo schváleno FMZV a presidiem ČSAV. Organizační výbor pod vedením prof.Mosteckého se sešel 2 x. Programový výbor, kterému předsedá Dr.Rubeška 1 x. Dr.Kuba vyzval všechny vedoucí odborných skupin ke spolupráci.

Dr.Mráz zhodnotil práci atomové sekce. Za uplynulé období se uskutečnily všechny plánované akce a 1 akce mimo plán. Bylo prosloveno 123 přednášek, kterých se zúčastnilo 650 pracovníků.

Ing.Moravec zhodnotil činnost molekulové sekce. Za uplynulé období se uskutečnilo 50 přednášek, kterých se zúčastnilo 184 pracovníků.

Dr.Kuba oznámil žádost Dr.Horáka, aby byl ze zdravotních důvodů uvolněn z funkce vědeckého tajemníka. Hlavní výbor vzal žádost Dr.Horáka s poctiváním na vědomí a do funkce vědeckého tajemníka zvolil Dr.Rubešku.

Dr.Moldan požádal hlavní výbor o schválení předsednictvem vypracovaných směrnic pro pořádání konferencí a seminářů. Směrnice byly schváleny a budou rozeslány všem vedoucím skupin.

Dne 4.prosince 1974 byla uspořádána v Národním technickém muzeu tisková konference. Cílem tiskové konference bylo seznámit zástupce sdělovacích prostředků s výsledky a úspěchy čs.spektroskopie.

Téhož dne v odpoledních hodinách byli přijati zástupci Čs.spektroskopické společnosti akademikem J.Kožešníkem, aby předali sdružený socialistický závazek, uzavřený na počest 30.výročí osvobození Československa Sovětskou armádou.

Dne 5.prosince 1974 se konalo v Národním technickém muzeu v Praze 7 slavnostní valné shromáždění Čs.spektroskopické společnosti u příležitosti 25. výročí organizované spektroskopie v ČSSR.

Ve slavnostním projevu zhodnotil práci ČSSS zástupce Federálního ministerstva pro technický a investiční rozvoj s. prof.Ing.Milan Kubát CSc.

Činnost ČSSS ve svém projevu zhodnotil předseda Společnosti RNDr.Josef Kuba CSc.

U příležitosti 25.výročí organizované spektroskopie v ČSSR byli jmenováni čestnými členy Společnosti zakládající členové Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze :

s. Dr.M.Spálenka, s.Dr.M.Číha, s.Dr.J.Litomiský, s.J.Mojžíš,
s.Ing.L.Kučera in memoriam, s.Ing.J.Poláček in memoriam.

Na valném shromáždění byla proslovena přednáška :

K. B i č o v s k ý , Výzkumný ústav ČKD, Praha :
Podíl Československé socialistické republiky na výzkumu a svě-
tové produkci referenčních materiálů.

Přednáška je otištěna na konci tohoto Bulletinu.



Šedesát let

RNDr. Josefa K u b y CSc
laureáta Státní ceny Klementa Gottwalda

(11.3.1915)

Spektrochemická analýza zaujímá v posledním období významné postavení v rozvoji našeho národního hospodářství, vědy a výzkumu. Tato skutečnost není náhodná, je výsledkem poctivé a usilovné práce celé řady československých spektroskopiků. Jedním z těch, který stál u základů československé spektroskopie a výrazně přispěl k jejímu budování, je RNDr. Josef Kuba CSc.

Již jako student Přírodovědecké fakulty Karlovy university v Praze se celkově zajímal o problematiku spektrochemické analýzy. Po nástupu do Výzkumného ústavu ČKD v roce 1939 se s nevšedním elánem pustil do budování spektrochemické analytické laboratoře. Pod jeho vedením brzy zde vyrostlo pracoviště vysoké odborné úrovně, jehož pracovní výsledky byly s neobyčejným uznáním přijímány nejen doma, ale i za hranicemi našeho státu. Šlo zejména o celou řadu průkopnických metod kvantitativní spektrochemické analýzy kovů a slitin, propracoval metodiku spektrochemické kvalitativní analýzy, pro potřeby čs.hospodářství zkonstruoval známý stiloskop ČKD a vypracoval

val metodiku vizuální spektroskopie. Je zakladatelem oboru automatické spektrometrie v ČSSR.

Mimořádné zásluhy Dr.Kuby o výzkum a vývoj metod spektrochemické analýzy ocenila československá vláda v roce 1955 udělením Státní ceny Klementa Gottwalda.

Dr.Kuba se rovněž aktivně podílel na budování a práci Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze. Od jeho založení patřil k předním funkcionářům a od roku 1960 až do roku 1967 pracoval ve funkci předsedy Sdružení. Po vzniku Čs. spektroskopické společnosti při ČSAV v roce 1967 zastával funkci místopředsedy a v roce 1973 byl zvolen předsedou.

K významnému životnímu jubileu přejeme Dr.Kubovi pevné zdraví, mnoho nových tvůrčích sil a pracovních i životních úspěchů. Přejeme si, aby RNDr.Josef Kuba CSc ještě dlouho stál v předních řadách bojovníků za technický pokrok, za lepší život nás všech.



ATOMOVÁ SEKCE

Odborná skupina spektroskopie kovů

Národní technické muzeum ve spolupráci s Čs. spektroskopickou společností při ČSAV a Výzkumným ústavem ČKD Praha uspořádalo ve dnech 2. - 6. září 1974 seminář "Racionalizace a rozvoj spektrochemických analytických metod". Semináře se zúčastnilo 60 pracovníků a 2 zahraniční hosté.

Neustálý rozvoj v oblasti výroby a výzkumu je doprovázen stále výraznějším používáním spektrochemických analytických metod se zvyšujícím se hospodářským efektem. Zdaleka však ještě nebyly vyčerpány všechny možnosti, které spektrochemické analýzy v racionalizaci výroby a výzkumu mohou poskytnout.

Vysoká rychlost a univerzálnost metod automatické spektrometrie především umožňuje využít spektrochemických analytických metod i k přímému řízení výrobních procesů počítačem. Velká pracovní kapacita a nízké provozní náklady dovolují provádět výzkumné práce velkého rozsahu např. v oblasti studia vlastností materiálů i technologických procesů.

Cílem semináře bylo zhodnotit dosažené výsledky a naznačit směry a možnosti dalšího využívání spektrochemických analytických metod. Jednání bylo zaměřeno na okruh problémů, spojených s automatickou spektrometrií a vytyčení možností spektrochemické analýzy v celé její šíři.

Důležité postavení mají i otázky, spojené s roz-

vojem a využíváním vizuálních spektroskopických metod a spektrografie. Tyto otázky nabývají zvláštní důležitosti zvláště v podmínkách malých a středních závodů s ohledem na náklady, spojené s vybavením laboratoří nákladnými spektrometry. Porada byla tedy zaměřena i na podnícení intenzivnějšího rozvoje i v této oblasti.

V rámci semináře byly uspořádány 2 panelové diskuse na téma "Současný stav a rozvoj spektrochemické analýzy" a "Zvýšení rychlosti a universálnosti spektrochemické analýzy". Byly předneseny přednášky :

J. K u b a , Národní technické muzeum, Praha : Racionalizace a rozvoj spektrochemických analytických metod.

J. S e d l á k , INORGA, Praha : Počítač ve spektroskopickém experimentu a praxi.

M. D v o ř á k , Výzkumný ústav ČKD, Praha : Zkušenosti z rozvoje spektrochemických analytických metod ve Výzkumném ústavu ČKD.

I. R u b e š k a , Ústřední ústav geologický, Praha : Racionalizace spektrochemických analytických metod v oboru geologie.

K. K u b o ň , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava : Organizace práce a ekonomika kvantometrické stanice hutního závodu.

M. M á t l , Geologický průzkum, Rýmařov : Úprava povrchu pro spektrální analýzu kompaktního slinutého karbidu.

W. K l i m e c k i , Institut Metalurgii Politechniki, Polsko : Využití laserové mikroanalýzy ke stanovení vměstků Al_2O_3 v ocelích.

J. K é t h e l y i , Maďarsko : Použití jednoštítkové techniky k určování jakosti oceli.

J. K é t h e l y i , Maďarsko : Hlavní subjektivní činitelé při aplikaci metod vizuální spektroskopie.

O. S t a ň k o v á , Výzkumný ústav ČKD, Praha : Přehled vývoje v oblasti vizuální spektroskopie.

T. H a m a c s e k , ZVJE Škoda, Plzeň : Aplikace metody šířky čáry ve vizuální spektrochemické analýze hliníkových a měděných slitin.

M. D v o ř á k , Výzkumný ústav ČKD, Praha : Zkušenosti s využitím sekvenčního kvantometru ARL model 33 000.

J. M r á z , Výzkumný ústav ČKD, Praha : Využití spektrochemických analytických metod ke studiu mechanických vlastností materiálů.

E. P l š k o , Geologický ústav UK, Bratislava : Perspektivy racionalizačního využití spektrochemických analytických metod.

B. P o l e j , VŠCHT, Praha : Teoretické omezení rychlosti a universálnosti spektrochemického analytického procesu.

J. L e g o , Elektrotechnická fakulta ČVUT, Praha : Zdroje a detektory záření umožňující zkrácení spektrochemického analytického procesu.

J. H o u s k a , Výzkumný ústav ČKD, Praha : Studium elektrického výboje při kvantometrické analýze.

B. Ž a r o v , ČVUT, Praha : Studium matrixefektů při spektrochemické analýze litiny.

J. M r á z , Výzkumný ústav ČKD, Praha : Matrixové křivky a jejich využití v analytické praxi.

V. H á j e k , INORGA, Praha : Problémy automatizace procesu vyhodnocování.

J. S e d l á k , INORGA, Praha : Algoritmus spektrochemického analytického procesu.

D. T ě š í n s k á , INORGA, Praha : Algoritmus funkční kontroly přístroje - kalibrace.

M. H o r á k , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV, Praha, M. H a l m i c h , Onkologický ústav, Praha : Hodnota informace uložená v identifikačním znaku.

K. P i c e k , Výzkumný ústav ČKD, Praha : Metody studia efektivnosti provozu spektrochemické laboratoře.

Odborná skupina spektroskopie nevodivých materiálů

6. pracovní schůze se konala dne 19. září 1974 na katedře chemie Hutnické fakulty VŠT v Košicích. Schůzi řídil doc. Ing. Mikuláš Matherny CSc.

Byla přednesena přednáška :

K. L a q u a , Institut für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie, Dortmund, BRD : Die Glimmlampe, eine Lichtquelle für universale und vollständige spektrochemische Analysen.

Glimmentladungen in der von Grimm beschriebenen Lampe unterscheiden sich von Hohlkathodenentladungen in einer Reihe von wesentlichen Eigenschaften : Die Entladung ist in ihrer Ausdehnung behindert durch das der Kathode gegenüberstehende Anodenrohr. Durch diese Behinderung kann bei höheren Strömen eine anomale Entladung mit hoher Brennspannung erzwungen werden. Von der als Kathode geschalteten Probe wird dann ein der Endfläche des Anodenrohrs entsprechendes Flächenstück Schicht für Schicht durch Kathodenzerstäubung abgetragen. Im Abbaugleichgewicht entspricht die Zusammensetzung des so entstandenen atomaren Dampfes der ursprünglichen festen Probe. Der Dampf wird in einer Niederdruckentladung angeregt. Dadurch wird wegen der geringen Wahrscheinlichkeit von störenden Stößen das Auftreten von Matrix- und Partnereffekten ausgeschaltet oder doch sehr verringert. Die Spektrallinien sind schmal (geringe Doppler- und Stossverbreiterung) und ändern

ihr Profil über grössere Konzentrationsbereiche kaum (geringe Selbstabsorption und Selbstumkehr). Die Lampe brennt ruhig und sehr reproduzierbar. Die wesentlichen Betriebsparameter sind Arbeitsgas, Gasdruck, Strom und Spannung. Das Arbeitsgas - meist wird Argon verwandt - bestimmt sowohl die Zerstäubungsrate (je schwerer die Gasatome desto grösser die Zerstäubungsrate) als auch den spektralen Charakter (je höher die Ionisierungsspannung des Gases, desto höhere Spannungen stehen für die Anregung der Probenatome zur Verfügung).

Die analytischen Eigenschaften der Glimmentladungen lassen sich in folgender Weise zusammenfassen : Unmittelbar können Metalle und Legierungen mit feinkörniger Struktur analysiert werden. Das Nachweisvermögen ähnelt dem von nachweisstarken Funkenentladungen. Die Genauigkeit der Bestimmungen ist so gut wie die der besten anderen spektralanalytischen Verfahren, in vielen Fällen besser. Die Eichkurven sind - zumindest in doppelt logarithmischer Darstellung - gerade. Dieselbe Analysenlinie kann für einen grossen Konzentrationsbereich benutzt werden. Es können Linien sonst schwer anregbarer Elemente (z.B. der Halogene) im Vakuum-UV angeregt werden. Die Bestimmung von Gasen in Metallen ist routinemässig möglich. Wegen des gleichmässigen Materialabbaus können der Aufbau und die Struktur von Oberflächen, auch von Schichten, untersucht werden. Nichtmetalle, z.B. Gesteine, Minerale, Erze, Schlacken, Gläser, Halbleiter werden als Kupfer-, Silber- oder in Ausnahmefällen auch als Kohlepresslinge analysiert. Ein Schmelzaufschluss ist oft nicht notwendig. Auch hier lassen sich für viele Elemente Nachweisgrenzen von weniger als 1 ppm erreichen. Die Genauigkeit ist so gross, dass die Bestimmung von Hauptbestandteilen in Konkurrenz zu Röntgenfluoreszenzmethoden sinnvoll ist. Die Eichung kann in einfachster Weise für einen nahezu unbeschränkten Probenbereich erfolgen. Auch Anionen (z.B. Carbonate, Sulfide) können bestimmt werden. Lösungen können auf verschiedene Weise analysiert werden.

Ve dnech 14. - 16. října 1974 se konal "Seminar o budení spektier a analýze nerastných materiálov s použitím emisnej spektrochemickej analýzy a atómovej absorpcie", ktorý byl pořádán u příležitosti 30. výročí SNP v Modre - Pieskoch. Semináře se zúčastnilo 40 účastníků.

Byly předneseny přednášky :

J. P e t r o v i č , Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava : Význam SNP pre budovanie socialistického Československa.

V prednáške bol zhodnotený vývoj robotníckeho hnutia v predmníchovskej ČSR, príčiny jej rozpadu a prechod pokrokových síl do ilegality.

Podrobne bola zhodnotená úloha ilegálneho vedenia KSS pri príprave ozbrojeného povstania slovenského ľudu proti fašizmu. V ďalšom bol zhodnotený význam vojenských operácií Slovenského národného povstania pre urýchlenie oslobodenia našej vlasti Červenou armádou, ako aj význam SNP pre ďalší povojnový rozvoj a budovanie socializmu.

V. T r u n e č e k , Katedra fyzikální elektroniky Přírodovědecké fakulty UJEP, Brno : Pochodňový výboj a pochodňový oblouk jako zdroj spekter.

Na elektrodách, na nichž je vysokofrekvenční napětí kolem 2 kV při frekvenci 4 MHz a výše, vznikají při atmosferickém tlaku jednopólové vf výboje. V podstatě rozlišujeme tři druhy těchto výbojů : vf koronu, pochodňový výboj a pochodňový oblouk.

Ve vf koruně nastává excitace a ionizace molekul, resp. atomů plynu, v němž výboj hoří, při srážce s elektronem, který je urychlován silným elektrickým polem.

Když zvýšíme vf výkon uvolňovaný ve výboji, změní se vf korona na pochodňový výboj. Plazma tohoto výboje je ve stavu blízkém lokální termodynamické rovnováhy a excitace plynu v jádře tohoto výboje je termická. Na elektrodě pochodňového výboje, v elektrodové plošce však zůstává silné elek-

trické pole a excitační podmínky jsou zde obdobné jako ve vf koruně.

Když se ve výboji uvolňuje tak značný výkon, že se roztaví a vypařuje elektroda, na níž výboj hoří, plazma výboje se tvoří z par materiálu elektrody; vlastnosti takového výboje jsou v mnohém analogické vlastnostem obloukového výboje a proto se tento výboj nazývá pochodňový oblouk.

Jako spektrální zdroje se uplatňují pochodňový výboj a pochodňový oblouk. Plazma pochodňového výboje je tvořeno z plynu, v němž výboj hoří, proto je tento výboj vhodný pro analýzu plynů. Nejvíce spektrálních studií bylo však provedeno v plamenové spektrální analýze náhradou kyslíko-acetylenového plamene pochodňovým výbojem.

Pochodňový oblouk tvoří své plazma z par materiálu elektrody, na níž hoří, proto je vhodný k analýze kovů a polovodičů. Analýzu izolátorů, polovodivých látek, minerálů, rud lze velmi rychle provést tak, že bez jakékoliv úpravy vložíme vzorek přímo do plamene pochodňového výboje. Plazma výboje rozpálí vzorek a plamen nad vzorkem se spektrálně zabarví. U polovodivých látek se na vzorku vytvoří elektrodová ploška, v níž nastává velmi silné rozprašování bombardováním vzorku elektrony.

Teplota pochodňového výboje je 2 500 °K až 5 000 °K, proto je počet atomárních čar ve spektru a také spektrální citlivost pro analýzu některých prvků větší, jestliže v plamenové spektrální analýze místo obvyklých zdrojů používáme pochodňový výboj.

Literatura : V.Truneček: Folia Fac.Sci.Nat.Universit.Brno VIII, 1967.

K. F l ó r i á n , M. M a t h e r n y ,
N. P l i e š o v s k á , Katedra chémie Hutníckej fakulty VŠT, Košice : Optimalizovanie experimentálnych podmienok pri spektrochemickej analýze nevodivých materiálov.

Úlohou tejto práce bolo preskúmať podmienky spektrochemickej analýzy vedľajších prvkov v sintrovanej magnézii.

Predovšetkým pozornosť bola venovaná skúmaniu podmienok vo výboji. Pre stanovenie podmienok vo výboji bola použitá metóda tzv. teplotných vanádových indexov. Táto metóda, navrhnutá Holdtom /1/ bežne sa využívala na indikáciu metrixefektu. Ale nakoľko podiel intenzít iónovej a atómovej čiary je zvlášť citlivý na zmenu podmienok budenia, je preto zachovanie rovnosti intenzít oboch čiar dobrým kritériom stability podmienok vo výboji /2/.

Stabilita výboja sa skúšala na 6 vybraných matrixoch sintrovanej magnézie. Bolo vyskúšané 11 spôsobov budenia. Budiace podmienky sa menili štyrmi rôznymi spôsobmi :

1. menili sa elektrické parametre výboja (± 100 , + 50 zápalov za s.)
2. menila sa doba predexpozície (5 sek, 7 sek)
3. menil sa typ a kvalita elektród (SU-302, SU-304 a SW-302, SW-304)
4. vzorky sa miešali s rôznymi spektrochemickými prísadami v pomere 1:9, 1:8:1 a 2:6:2 len s grafitovým práškom a s grafitovým práškom v zmesi s kysličníkom meďnatým.

Ako najoptimálnejšie budiace podmienky boli zvolené :

| | |
|---------------------------|-------------------------|
| Nosná elektróda | SW-304 |
| Protielektróda | SW-201 |
| Druh budenia | oblúk striedavého prúdu |
| Budiaci zdroj | BIG-100 |
| Polarita nosnej elektródy | ± 100 a + 50 |
| Počet zápalov za sekundu | |
| Predexpozícia | 5 sekúnd |
| Expozícia | 20 sekúnd |

Literatúra :

/1/ Holdt G., Appl.Spectroscopy 16, 96 (1962)

/2/ Zajdel A.N., Spektirálni analyza, SNTL, Praha (1970)

E. P l š k o , J. C h u d ý , Geologický ústav PFUK, Bratislava : Spektrochemická analýza malých množstiev vzorky.

V práci sa poukazuje na tri najbežnejšie typy

vzoriek geologických materiálov a to na práškové vzorky, nábrusy a jednotlivé zrníčka. V prvom prípade býva zvyčajne relatívny dostatok vzorky. Z uvedených dôvodov je potrebné preto zvyšovať koncentračnú dôkazuschopnosť. V prípade nábrusov poskytuje vhodné výsledky laserová mikroanalýza. Táto však slúži najmä pre identifikačné účely. Pri vzorkách geologických materiálov vo forme jednotlivých zrníčok je potrebné zvýšiť absolútnu dôkazuschopnosť pre čo možno najmenšie množstvá. Často-krát sa tu opäť používa laserová mikroanalýza, pričom vzorky musia byť vhodným spôsobom fixované.

Pre zvýšenie absolútnej dôkazuschopnosti sa študujú možnosti jej zvýšenia rozšírením šírky štrbiny spektrálneho prístroja, ako aj predsvetlením fotografického materiálu. V ďalšom sa podávajú podmienky totálneho splynenia vzorky z kráteru elektródy a to ako v prípade zrníčka, tak i v prípade jeho homogenizovania s uhlíkovým práškom. Dosiahnuté dôkazuschopnosti niekoľko desiatok nanogramov sú značne lepšie než v prípade použitia laserovej mikroanalýzy a porovnateľné s hodnotami pre bežnú spektrochemickú analýzu s dostatečným množstvom vzorky.

V. S t r e š k o , Geologický ústav PFUK, Bratislava : Porovnanie stanovenia mikroprvkov v sírnikových mineráloch emisnou spektrochemickou a atómovou absorpčnou analýzou.

V práci sú porovnávané výsledky stanovenia mikroprvkov sírnikových minerálov emisnou spektrochemickou analýzou a atómovou absorpčnou spektrometriou. Štúdium sa prevádzalo na geochemických sírnikových štandardov : pyrit PS-1 a sfalerit SF-1 (Mineralogický inštitút, Freiberg).

Uvedenými metódami boli v pyrite stanovované nasledujúce prvky : Ag, Co, Ni, Pb, Zn, As, Cu a Mn. Vo sfalerite boli analyzované : Co, As, Cd, Mn, Sb, Cu a Pb. Na základe výsledkov stanovenia jednotlivých prvkov dodaných s pyritom PS-1 a s sfaleritom SF-1 boli vypočítané priemerné hodnoty a navrhnuté doporučené hodnoty. Atómovou absorpciou ako i spektrochemickou analýzou boli pyrit a sfalerit analyzované na uvedené prvky 10 krát. Z doporučených hodnôt, ako i z hodnôt zís-

kaných spektrochemickou analýzou a atómovou absorpciou, boli potom vypočítané intervaly spoľahlivosti a graficky vynesené pri obidvoch mineráloch. Pri porovnaní uvedených výsledkov sa ukázalo, že hodnoty spektrochemickej analýzy sa lepšie zhodovali s doporučenými hodnotami v pyrite ako vo sfalerite. Celkovo vo väčšine prípadov intervaly spoľahlivosti sa ukázali lepšie pri atómovej absorpčnej spektrometrii, ako pri spektrochemickej analýze. Prvky stanovované spektrochemickou analýzou vo sfalerite sú nadhodnotené. Podobne pri analýze geologických vzoriek tieto rozdiely boli vyššie u sfaleritov ako u pyritov.

J. C u b í n e k , Geologický ústav Dionýza Štúra, Bratislava : Využitie spektrochemickej analýzy pre riešenie niektorých geochemicko-genetických problémov.

V práci sa rieši geochemia melafýrových hornín z územia Malých Karpát.

V úvodnej časti sa podáva stručná charakteristika stratigrafie a geológie vulkanického súvrstvia chošskej jednotky Malých Karpát, dotýka sa stavby a foriem vulkanických telies melafýrového magmatizmu, veľmi stručne aj petrografická charakteristika melafýrov a ich tufov. Melafýrové horniny sú petrograficky a geneticky rozčlenené do štyroch základných skupín a to do jemnozrnných, porfyrických, porfyricko-mandľovcových a mandľovcových melafýrov.

V osobitej časti sa práca zaobera petrochémiou melafýrov a korelačnými vzťahmi jednotlivých Niggliho číselných charakteristik.

Hlavným zámerom práce bolo zhrnutie základných údajov o obsahoch a distribúcií mikroelementov : Li, Rb, Sr, Ba, Sc, Y, La, Yb, Zr, V, Cr, Co, Ni, Cu, Ag, Zn, B, Ga, Pb v rámci vyššie uvedených petrograficko-genetických typov.

Štúované mikroelementy boli stanovované šiestimi odlišnými spektrochemickými metódami :

1. metódou - Sr, Ba, Zr, V, Cr, Co, Ni
2. metódou - Cu, Ag, Pb
3. metódou - (TR)
4. metódou - Li, Rb, Cs

5. metódou - B

6. metódou - Zn (AAS)

Týmto sa dosiahla vyššia reprodukovateľnosť výsledkov analýz daných prvkov, hlavne u (TR) a alkálii.

Správnosť výsledkov analýz mikroelementov boli porovnávané s výsledkami svetových štandardov (BCR-1, GSP-1, AGV-1, W-1) a 30 analýzami melafýrových a diabázových hornín medzi spektroskopickým laboratóriom GÚ-SAV a GÚDŠ.

Mikroelementy boli sledované z hľadiska všeobecných zákonitosti distribúcie týchto prvkov, z hľadiska vzájomnej korelácie ich obsahov ako aj relatívnej početnosti ich obsahov v jednotlivých genetických typoch melafýrových hornín.

J. K u b o v á , E. P l š k o , Geologický ústav PFUK, Bratislava : Spektrochemické stanovenie bóru v ultrabázických horninách.

Kvantitatívne spektrochemické stanovenie bóru v koncentráciách v rozmedzí 1 - 10 ppm je v súčasnej dobe obtiažný analytický problém. Vyplýva to z okolností, že bór má použiteľné len dve spektrálne čiary, ktoré koincidujú s viacerými zložkami spektra. Okrem toho je to prvok pomerne ťažko prchavý a vytvárajúci s uhlíkom karbidy. Bolo preto potrebné zaistiť vhodné experimentálne podmienky pre získanie čo najintenzívnejších čiar.

Použitím dvojnásobného prechodu žiarenia mriežkou spektrálneho prístroja PGS-2 sa podarilo odstrániť koincidenčnú čiaru B I 2497,733 Å s čiarou železa, a koincidenčnou s komponentou pásu SiO sa korigovala odpočítaním intenzity komponenty pásu SiO 2497,56 Å.

Ako vhodné sa ukázalo budenie v obluku striedavého prúdu po intenzite 12 A. Čo sa týka spektrálnych prísad, najlepšia dôkazochopnosť sa dostala s prímiesou kyslíčnika galitého. Ani jeden z osvedčených vnútorných porovnávacích prvkov nebol tak účinný, ako komponent molekule pásu SiO pri 2497,22 Å, ktorá sa v ďalšom používala ako porovnávacía zložka. Dosiahla sa medza postrehu 1 ppm B, priemerná relatívna štan-

dardná odchylka 0,067 a pracovať sa môže v koncentračnom rozmedzí do 1 % B.

Z. S l o v á k , J. T o m a n , VÚCh Lachema n.p.
Brno : Kontrola kvality Y_2O_3 pro monokrystaly; možnosti přímého spektrografického stanovení lanthanidů.

Pro stanovení Al, Ca, Fe, Cu, Mg, Mn, Pb, a Ni v kyslíčnicku yttritím pro monokrystaly byly vypracovány postupy stanovení AAS ze společného zásobního roztoku vzorku. Pro stanovení Cu, Ni a Pb je navrženo stanovení po extrakci chelátů s APDC do MIBK z 0,1N HCl. Ostatní uvedené nečistoty se stanovují z vodného 2 % roztoku vzorku metodou přidávků při zmlžování Al v plameni kyslíčnick dusný-acetylen a ostatních nečistot v plameni vzduch-acetylen.

Postup stanovení byl včleněn do PND 50-336-72.

Pro přímé spektrografické stanovení lanthanidů v Y_2O_3 byl vypracován postup s buzením práškové směsi 67 % vzorku, 30 % grafitu a 3 % NaCl ve stejnosměrném oblouku v atmosféře Ar+O₂. Spektrum je fotografováno mřížkovým spektrografem PGS-2 o reciproké lineární dispersi 3,6 Å/mm v použité oblasti spektra. Pořízené analytické křivky pokrývají koncentrační obory zhruba 2 řádů od 0,5 ppm La a 10 ppm Ce výše v analysovaném Y_2O_3 . Tyto spodní hranice analytických křivek, i když se nejedná o odhady mezi postřehu, jsou ve srovnání s dosud publikovanými údaji mezi postřehu lanthanidů v Y_2O_3 vesměs podstatně nižší. Reprodukovatelnost stanovení ověřovaná na 2 vzorcích při koncentracích nečistot, odpovídajících dolním částem analytických křivek, charakterizovaná $s_{rel.}$ (pro n = 11, resp. 12) je u La, Eu a Yb = 15%, Dy 9 % a Sm 27 %.

M. M á t l , Geologický průzkum, Ostrava : Rozbor umělých diamantů metodou "konstantní teploty".

Příspěvek se zabývá aplikací metody "konstantní teploty" na analýzu umělých diamantů do velikosti zrna 0,2 - 0,3 mm. Původní metoda podle Addinka je modifikována tak, že je používán "vnitřní" vztažený prvek (Cu), jako srovnávacích

vzorků je použito uměle znečištěného grafitu, katoda má parabolický tvar (SU 202). Vzorek diamantu je nanesen na vrstvě Cu + grafit (v poměru 1 díl CuO : 15 dílů grafit) a převrstven grafitovým práškem. Srovnávací vzorky jsou zpracovány obdobně, ale obě spodní vrstvy jsou smíchány dohromady.

Toto uspořádání zaručuje stabilnější hoření oblouku (katoda) při zachování konstantní teploty během celé expozice (úplné spálení vzorku - 4 min), do značné míry stírá rozdíly mezi vypařovacími křivkami nečistot u diamantů surových, loužených (HF, HCl + HNO₃), srovnávacích vzorků a přidávané mědi a zabraňuje mechanickému vyhazování vzorku během hoření.

Po předchozím zpracování vzorku kyselinami (HF, HCl + HNO₃) je možné zhruba rozlišit nečistoty uzavřené intersticiálně či substitučně v krystalech diamantu od těch, které tvoří vně krystalů samostatnou fázi. Reprodukovatelnost stanovení Cr, Mn, Fe, Co a Ni je \pm 7,8 - 8,9 %; Si, Al, Mg, Ge mezi \pm 12,0 - 13,5 %.

E. M a r t í n y , Geologický ústav SAV, Bratislava,
V. S t r e š k o , Geologický ústav PFUK, Bratislava :
Stanovenie makrozložiek v geologických materiáloch pomocou AAS.

V predloženej práci sa autori zaoberali možnosťami stanovenia hlavných zložiek v niektorých geologických materiáloch. Spôľahlivosť stanovenia vysokých koncentrácií prvkov bola sledovaná analyzovaním štandardných referenčných materiáloch atomovou absorpciou a to stanovením zinku v geochemickom štandarde sfaleritu SF-1, železa v pyrite PS-1 (obidva GI Freiberg), horčíku v analytickom štandarde magnezitu (ÚNS Kutná Hora) a vápniku vo vápenci GFS-401 (USA). Účelom práce bolo zistiť spoľahlivosť stanovenia uvedených prvkov štatistickým hodnotením získaných výsledkov. Vypočítané boli z nameraných hodnot štandardné a relatívne štandardné odchylky a priemerné hodnoty boli porovnané s doporučenými. Každý z uvedených štandardov bol analyzovaný 12 krát.

Stanovenia jednotlivých prvkov boli prevádzané za použitia najcitlivejších, ako i sekundárnych rezonančných čiar a pri rôznych typoch a polohách horákov. Vzorky boli navažova-

né po 1 gr. a základný roztok obsahoval 10 mg/l ml analyzovanej vzorky. Snahou autorov bolo zistiť také podmienky stanovenia, ktoré by vyžadovali minimálne riedenie základného roztoku pri maximálnej spoľahlivosti stanovenia.

Pri stanovení zinku sa ukázalo, že tento je možné stanovovať z pôvodného roztoku pri sekundárnej rezonančnej čiare najvýhodnejšie za použitia štandardného a trojštrbinového horáku v normálnej polohe. Presnosť a správnosť stanovenia horčíka pri 10 násobnom zriedení základného roztoku je možné prevádzať pri sekundárnej rezonančnej čiare (202,5 nm) a krátkom otočnom horáku. Pri stanovení železa najsprávnejšie výsledky boli získané pri 100 násobnom riedení za použitia štandardného horáku v normálnej polohe a pri použití sekundárnych rezonančných čiar (271,9 resp. 3719 nm). Najvyššia spoľahlivosť vápniku stanovovaného v referenčnom materiáli bola dosiahnutá pri primárnej rezonančnej čiare, 20 násobnom riedení a otočnom krátkom horáku.

J. D e m p í r , Ústav neroztrých surovín, Kutná Hora : Stanovení stroncia v pitných vodách metódou atomové absorpční spektrofotometrie.

Přímé stanovení stroncia v pitné vodě není možné pro malou citlivost stroncia při atomové absorpční spektrofotometrii; je nutno je nejprve zkoncentrovat z většího objemu zkoušené vody. Kvantitativních výsledků bylo dosaženo při srážení uhličitanem sodným. Srážení štavelanem amonným je možno použít pouze pro malé koncentrace (do obsahu asi 0,2 mg/l Sr), při vyšších obsazích není vyloučení stroncia kvantitativní. Depresivní vliv vápníku, který snižuje signál stroncia, se odstraní přísadou roztoku, obsahujícího chlorid lanthanitý a 8-hydroxychinolin.

Pracovní návod : Ke vzorku zkoušené vody (500 ml) se přidá srážecí roztok, obsahující 10 % uhličitanu sodného a 5 % hydroxidu sodného (20 ml), voda se zahřeje na 80 °C a při této teplotě se udržuje jednu hodinu. Po zchlazení vody se sraženina uhličitanů vápenatého a strontnatého odfiltruje filtrem "bílá páska", promyje se 1%-ním roztokem uhličitanu sod-

ného a rozpustí na filtru v 50 ml 0,5 N HNO₃. Vzniklý roztok se odpaří na objem asi 20 ml, převede se do 25 ml odměrné baňky a přidá se 2%-ní roztok chloridu lanthanitého a 10%-ní roztok 8-hydroxychinolinu, které jsou rozpuštěny v kyselině octové 1 : 1 (2 ml).

Měření se provede na atomovém absorpčním spektrofotometru s roztaženou stupnicí s použitím linie 460,7 nm. Vyhodnocení se provede standardními roztoky, které obsahují 0,0 - 0,3 mg/25 ml Sr.

Tímto postupem byly v pitných vodách měst Čech a Moravy nalezeny obsahy stroncia 0,X - X mg/l.

E. F e r i a n č i k , J. A m b r u š , Geologický prieskum n.p., Spišská Nová Ves : Problematika stanovenia vyšších obsahov bárya v plameni acetylén - vzduch.

Sú opísané niektoré možnosti analýzy vyšších obsahov bárya v silikátových horninách. Použitý rozklad vzoriek umožňuje stanovenie celkového bárya, tj. aj vo forme barytu.

Podrobne sa sleduje rušivý vplyv pásu CaOH pri absorpčnom stanovení. Navrhnutý postup eliminuje rušivý vplyv až 150 µg Ca/ml. Pre analýzu vzoriek s vyšším obsahom Ca je uvedený postup na izoláciu bárya vo forme zrazeniny síranu barnatého s nasledujúcim rozpustením tejto zrazeniny v amoniakálnom roztoku chelatonu III. Tým je odstránený nielen rušivý vplyv CaOH - pásu, ale aj iných iónov, napr. hliníka a titanu. Citlivosť stanovenia je však pri tomto postupe limitovaná rozpustnosťou BaSO₄.

Je diskutované aj o možnosti zvýšenia citlivosti použitím kolektorov.

Je sledovaný priebeh kalibračných kriviek pri rozprašovaní amoniakálnych roztokov chelatonátu bárya v plameni acetylén - vzduch, ako aj rozpustnosť síranu barnatého za rôznych pracovných podmienok.

Pre analýzu obsahov 0,10 - 2,00 % Ba je navrhovaný postup podstatne kratší a presnejší ako gravimetrické stanovenie bárya.

J. L e n c , Výzkumný ústav elektrotechnické keramiky, Hradec Králové : Stanovení chromu atomovou absorpční spektroskopii v korundových hmotách.

Byl vypracován analytický postup stanovení nízkých obsahů chromu v elektrokeramických hmotách na bázi α - Al_2O_3 , slinovaných při vysokých teplotách. Tyto hmoty vysoce rezistentní vůči rozkladu vyžadují k uvedení do roztoku postupné tavení s KHF_2 a H_3BO_3 a rozpouštění taveniny ve vodě okyselené HNO_3 . Chrom se stanovuje atomovou absorpcí přímo v dané osnově, depresivní vliv hliníku se koriguje modelováním srovnávacích roztoků hliníkem. Analyticky je využita rezonanční čára 357,9 nm a plamen mírně svítivý acetylen - vzduchový. V práci jsou uvedeny nutné instrumentální podmínky stanovení a dosažené výsledky.

Z. V a l c h a , Ústav nerostných surovin, Kutná Hora : Využití AAS při analytickém hodnocení standardních vzorků.

V rámci Stálé komise RVHP pro geologii bylo připraveno 15 standardních vzorků hornin a nerostných surovin, 6 vzorků je rozpracováno, výroba dalších je plánována. Ústav nerostných surovin v Kutné Hoře připravil za ČSSR tři standardy : magnezit MK (Košice), sklářský písek SpS (Střeleč), kaolin KK (Karlovy Vary).

Při analytickém hodnocení těchto standardů byla ve velké míře použita i atomová absorpční spektrometrie. Bylo to hlavně u stanovení manganu, hořčíku, vápníku, sodíku, draslíku, ze stopových prvků u mědi a zinku. Zajímavé je zvýšené využití AAS u posledně vyrobeného standardu - kaolinu. Výsledky, získané atomovou absorpcí, jsou většinou v dobré shodě jak mezi sebou tak i s průměrnými hodnotami.

Zmíněné čs. standardní vzorky prodává n.p. Labora, závod 32, Praha 8, Sokolovská 117. Vývoz československých a dovoz zahraničních standardů má zajišťovat Chemapol, Praha 10, Kodaňská 46.

Odborná skupina instrumentálních radioanalytických metod

8. pracovní schůze se konala ve dnech 2. - 3. října 1975 v Kolíně. Součástí semináře byla prohlídka radioanalytické laboratoře Ústavu nerostných surovin v Kutné Hoře spojená s praktickými ukázkami.

Schůzi řídil Ing. Miloslav Vobecký CSc a Ing. Zdeněk Kosina.

Byly předneseny přednášky :

J. Š i l a r , Katedra lékařské fyziky a nukleární medicíny LFH UK, Praha : Princip funkce a výsledné parametry polovodičových detektorů na bázi Si a Ge.

Polovodiivé materiály vhodné pro výrobu kvalitních spektrometrických detektorů musí splňovat řadu podmínek, z nichž nejzávažnější jsou :

- malá průměrná energie potřebná k tvorbě páru elektron - díra,
- malý počet volných nositelů náboje při pracovní teplotě,
- nízká koncentrace záchytných center a na ní závislá velká doba života minoritních nositelů náboje a nízká rekombinace signálního náboje
- krátká doba kolekce signálního náboje, která předpokládá vysokou pohyblivost nositelů náboje v materiálu a možnost vkládat vysoké napětí na detektor, aby bylo dosaženo intenzity elektrostatického pole řádově 10^3 V/cm.

Tyto požadavky - především požadavek nízké koncentrace záchytných center - redukují výběr komerčně dostupné suroviny pro spektrometrické detektory na vysoce kvalitní monokrystaly Si a Ge s koncentrací přímíšenin pod 10^{-9} a s prakticky dokonalou krystalickou strukturou.

Je popsán způsob snížení termicky generovaného proudu v materiálu Si a Ge vytvořením potenciální bariery, která vznikne po difuzi donorů do vysoce kvalitní suroviny s nízkou koncentrací akceptorových nečistot a vytvoření citlivé oblasti detektoru při vložení pracovního napětí v obráceném směru na přechod.

Jsou uvedeny podmínky pro účinnou kompenzaci elek-

tricky aktivních akceptorových nečistot driftem iontů Li pomocí elektrostatického pole.

Na základě v praxi dosahovaných základních parametrů monokrystalů Ge jsou uvedena možná zhoršení optimálních výsledných parametrů - energetické rozlišovací schopnosti a rychlosti náběhu impulsů Ge p - i - n detektorů v planární a koaxiální konfiguraci.

M. V i d r a , Ústav jaderného výzkumu ČsKAE,
Řež u Prahy : Údržba polovodičového detektoru a předzesilovače.

Referát je koncipován jako praktický návod k efektivnímu využívání nejchoulostivějších součástí polovodičového spektrometru z hlediska docílení maximální životnosti.

Je probírána diagnostika stavu germaniového polovodičového detektoru na základě výsledků měření voltampérové a volt-kapacitní závislosti. Pozornost je věnována efektům tzv. rozdriftování v důsledku náhodného ohřevu detektoru při nedostatku kapalného dusíku, ztráty vakua a pod.

Príspevek obsahuje i podrobný popis bezpečného postupu montáže a demontáže spoje detektor - předzesilovač, postup aplikace vysokého napětí i další praktické pokyny pro využití polovodičového spektrometru.

B. Š p a č e k , Ústav nerostných surovin, Kutná Hora : Zesilovací řetězec spektrometru při vyšších četnostech zpracovávaných impulsů.

Referát se v první části zabývá přehledem nepříznivých jevů souvisejících s vyššími zpracovávanými četnostmi impulsů, kdy se již výrazně projevuje nahodilý charakter jejich časového sledu. Pozornost je zejména věnována posunu základní hladiny střídavě vázaného zesilovače a efektu nakupení impulsů.

V další části se stručně rozebírá kalkulace pravděpodobnosti výskytu efektu nakupení, které vychází z předpokladu platnosti Poissonova rozdělení pro uvažovaný náhodný tok impulsů. Výsledky jsou graficky interpretovány.

Při rozboru nepříznivých vlastností střídavých va-

zeb v zesilovacím řetězci se popisuje možnost potlačení nežádoucích podkmitů, které produkuje jednoduchý RC derivační obvod z impulsu s dlouhou exponenciální sestupnou částí, pomocí korekčního obvodu, který realizuje přesunutí nuly přenosové funkce derivačního obvodu (pole - zero cancellation). Je kladen důraz na vhodnost používání stejnosměrně vázaných zesilovacích řetězců. Analyzuje se vliv druhu tvarování pulsu na chování zesilovače při vyšších četnostech.

Závěr referátu je věnován nelineárním obvodům, které umožňují redukovat uvedené nežádoucí projevy zesilovací trasy. Zde se popisují obnovitelné referenční hladiny (baseline restorer), jakož i obvody vylučující nakupené impulsy z dalšího zpracování (pile-up rejection).

Z. K o s i n a , Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež :
Potlačení vlivu síťového brumu a driftů elektronické aparatury na kvalitu spektra.

Příčinu zhoršení energetického rozlišení spektrometru lze m. j. přibližně identifikovat podle typu deformace píků. Zatímco elektronický šum způsobuje rozšíření píků při zachování jejich přibližně gaussovského charakteru, dochází v důsledku efektů nakupení, superposice brumu, jakož i driftů zesílení k výrazným odklonům od gaussiánu, které lze vyjádřit odklonem poměru $r = FWHM / Fw \frac{1}{10} M$ od r (gauss) $\pm 1,8$

K superposici brumu (při níž $r < r(\text{gauss})$) dochází v důsledku zemních smyček, úbytku napětí na síťových přívodech, vlivu rozptylových polí na koaxiální propojení vzdálených prvků zesilovacího řetězce a pod. Ve vlastním mechanismu zhoršení rozlišení zde významnou roli hraje integrální nelinearita obvodů před prvním derivačním článkem.

Omezení zmíněných efektů na únosnou mez lze dosáhnout použitím tzv. klidné země, souměrného koaxiálního vedení, případně aplikací techniky "plovoucí země".

Další diskutovanou příčinou zhoršeného rozlišení je zmíněný drift zesílení případně i nuly zesilovacího řetězce. Účinnou pomocí je použití stabilizátoru, korigujícího samovolné

změny zesílení (nuly) na základě číselného porovnávání skutečné a zadané velikosti analyzovaných impulsů příslušných zvoleným referenčním píkům spektra. Pozornost je zde nutno věnovat optimálnímu nastavení šířky stabilizačních oken a velikosti elementární korekce.

Nepříznivé projevy driftů lze účinně omezit i do-
datečnou úpravou (soukrytovaním) mezivýsledných spekter na sa-
močinném počítači. Měření je v tomto případě nutno rozdělit do
řady krátkých úseků.

M. V i d r a , Ústav jaderného výzkumu ČsKAE,
Řež u Prahy : Optimální spektrometrická trasa pro nízké četnos-
ti impulsů.

V příspěvku jsou diskutovány různé zdroje šumového
napětí vznikajícího v jednotlivých součástech spektrometrického
řetězce. Na základě známé frekvenční distribuce nejvýznamněj-
ších složek šumového napětí jsou odvozeny základní vztahy umož-
ňující volit optimální integrační a derivační konstanty hlavní-
ho zesilovače. Optimalizačním kritériem je dosažení maximální
hodnoty poměru signál/šum, při níž je zřejmě dosaženo nejlepší-
ho energetického rozlišení spektrometru.

Ze zmíněného hlediska jsou posuzovány různé typy
tvarování detektorových impulsů, od nejjednoduššího používané-
ho způsobu realizovaného pasivní dvojicí CR-RC obvodů až po slo-
žitě aktivní filtry sestavené z moderních operačních zesilo-
vačů.

Pozornost je věnována i nízkoenergetickým systé-
mům s vysokým rozlišením, v nichž jsou uplatňovány speciální
úpravy nábojově citlivých předzesilovačů (opto-elektronická
vazba a pod.).

V závěrečné části se příspěvek zabývá vlivem koneč-
né doby trvání detektorového impulsu na energetické rozlišení
systému.

J. Š i l l a r , Katedra fyziky a nukleární medicíny
LFH UK, Praha : Specifické problémy scintilační spektrometrie
gama.

Relativně špatná energetická rozlišovací schopnost
scintilačních detektorů záření gama ve srovnání s ionizačními
detektory s plynovou náplní nebo na bázi polovodičových detek-
torů Si a Ge je dána dvoustupňovým převodem energie - kinetic-
ké energie nukleární částice absorbované ve scintilátoru na fo-
tony emisního spektra scintilátoru a energie světla - daná poč-
tem fotonů a jejich průměrnou energií - na elektrický náboj.

U detekčních systémů s vybranými NaJ/Tl/ scintilá-
tory s malými rozměry a fotonásobiči s optimálními parametry je
možno dosáhnout průměrné hodnoty kolem 100 eV na jeden fotoelek-
tron. Pro systémy s velkoobjemovými NaJ/Tl/ krystaly a komerčně
dostupnými fotonásobiči se zvyšuje potřebná energie pro vyraže-
ní jednoho fotoelektronu na hodnoty až o řád vyšší.

U velkoobjemových NaJ/Tl/ krystalů dochází vlivem
barevných center vznikajících v procesu kultivace a temperace
krystalů a dlouhých drah fotonů k samoabsorpci fotonů vysoko-
energetické části emisního spektra, která spolu se zvýšeným
rozptylem lokálního luminiscenčního výtěžku a zvýšenou absorp-
cí fotonů v silné vrstvě skla okénka zhoršuje energetickou roz-
lišovací schopnost detektoru.

Zatím co kvalita současných fotonásobičů s malými
průměry fotokatod a s vylepšenými antimonocæsiovými, bi- a
multi-alkalickými fotokatodami přestala být limitujícím fakto-
rem ve zlepšení energetické rozlišovací schopnosti v oboru střed-
ních a vysokých energií fotonů gama nad 100 keV, je kvalita vel-
koplochých fotonásobičů dosud nedostačující. U detektorů s tu-
zemskými NaJ/Tl/ krystaly 100 x 100 mm a fotonásobiči 65PK423
je dosahováno 9 - 10 % pro ^{137}Cs . U těchto velkoobjemových de-
tektorů lze dosáhnout v nepřerušovaném provozu dobré krátkodo-
bé stability polohy fotopíku $^{137}\text{Cs} \pm 1\%$ kolem střední hodnoty.
U kvalitních fotonásobičů nepřesahuje změna - zpravidla zvýše-
ní výšky signálních impulsů - po 10 až 20 denním provozu hodno-
tu 2 - 3% za období 3 měsíců.

Vlivem kompenzace teplotní závislosti celkové ci-

tlivosti fotonásobičů (u našich fotonásobičů 61PK412 - 414 a 65PK423 s rostoucí teplotou klesá) a teplotní závislosti relativní luminiscenční účinnosti NaJ/Tl/ krystalů, která se s rostoucí teplotou do + 70°C zvyšuje, dochází u detektorů v teplotním oboru + 10° - + 20°C k malé závislosti výšky signálních impulsů na teplotě, je-li integrační konstanta na výstupu detektoru nastavena na hodnotu 1 - 2 μs. Se zvyšováním teploty nad 25°C klesá výška signálních impulsů; do teploty + 70°C nebylo u našich detektorů zjištěno podstatnější zhoršení energetické rozlišovací schopnosti pro ¹³⁷Cs.

Odborná skupina lokální elektronové mikroanalýzy

Ve dnech 13. - 16. října 1974 byla uspořádána ve Zvíkovském Podhradí letní škola "Elektronová mikroanalýza a řádkovací elektronová mikroskopie", které se zúčastnilo 59 pracovníků.

Letní škola byla zaměřena na prohloubení teoretických znalostí, zejména matematických a fyzikálních, v obou metodách. Diskuse byly zaměřeny na výměnu názorů a zkušeností z různých pracovišť. Program byl velmi náročný, ale podařilo se jej v úplnosti splnit díky aktivní účasti posluchačů.

Všechny přednášky jsou publikovány ve skriptech, která obdrželi účastníci letní školy.

Letní školu řídil organizační výbor v čele s Ing. Františkem Štorkem.

Byly předneseny přednášky :

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

F. Š t o r e k , Výzkumný ústav hutnictví železa, Praha : Některé novější konstrukční prvky přístrojů EMA a SEM.

V. D r a h o š , Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Elektronové optické prvky EMA a SEM a jejich soustavy.

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

V. H a n á k , ČVUT Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Praha : Detekce záření gama pomocí proporcionálních a scintilačních počítačů.

M. V i d r a , Ústav jaderného výzkumu ČSKAE, Řež: Detekce rtg záření pomocí polovodičových detektorů.

K. J u r e k , Geologický ústav ČSAV, Praha : Interakce elektronů s hmotou.

F. Š t o r e k , Výzkumný ústav hutnictví železa, Praha : Výsledky měření a kvantitativní analýza na EMA.

K. E c k s c h l a g e r , Ústav anorganické chemie ČSAV, Řež u Prahy : Základy statistického hodnocení výsledků měření.

V. H u l í n s k ý , VŠCHT katedra silikátů, Praha: Příprava vzorků a standardů.

A. R e k , VAAZ, Brno : Analýza lehkých prvků na EMA.

A. R e k , VAAZ, Brno : Strukturní rozlišovací schopnost.

F. Š t o r e k , Výzkumný ústav hutnictví železa, Praha : Analýza malých částic a tenkých filmů.

V. L a i c h t e r , Tesla VÚST A.S.Popova, Praha: Speciální metody zobrazení v řádkovací elektronové spektroskopii.

M. P a v l í č e k , Ústav jaderných paliv VZUP, Zbraslav : Korekční metoda v kvantitativní elektronové mikroanalýze.

F. Š t o r e k , Výzkumný ústav hutnictví železa, Praha : Provoz laboratoří EMA a SEM.

Odborná skupina plamenové spektroskopie

8. pracovní schůze se konala dne 18. listopadu 1974 v Ústavu makromolekulární chemie ČSAV v Praze.

Schůzi řídil RNDr. Ivan Rubeška CSc.

Byly předneseny přednášky :

F. R e i s i n g e r , Perkin-Elmer, Vídeň : The new AA spectrophotometer, Model 360.

B. F i e l d , Varian-Techtron, Zug : Use of AAS in the analysis of airborne particulates.

J. J a r o š , Ústav jaderných paliv, Zbraslav : Stanovení cínu, molybdenu a niobu ve vícesložkových zirkoniových slitinách.

V práci byly sledovány podmínky pro stanovení cínu, molybdenu a niobu ve vícesložkových zirkoniových slitinách. Vzhledem k dosažené velmi nízké citlivosti stanovení niobu absorpční plamenovou spektrometrií byl tento prvek stanoven emisní plamenovou spektrometrií. Stanovení byla prováděna na přístroji Beckman model 979, signál byl zaznamenáván na 10 palcovém zapisovači téže firmy. Jako zdroj záření byly použity výbojky s dutou katodou fy ASL. Laminární hořák fy Varian-Techtron byl opatřen hlavicí AB-50.

Byl sledován vliv složení plamene acetylen-kysličník dusný při 4 výškách pozorování na velikost signálu, vliv kyselin (HCl, HF, HNO₃, HClO₄, H₃BO₃), vliv alkalických kovů (Na, K, Cs), vliv kovů používaných k legování (Cr, Cu, Fe, Mo, Nb, Sn, V), vliv osnovy (Zr) a pro porovnání se zirkoniem i vliv hliníku. Největší interference byly zjištěny u niobu, ve většině případů došlo k výraznému zvýšení signálu. U molybdenu byl pozorován aniontový efekt u draselných solí.

K eliminaci interferencí byla použita technika modelových roztoků. Výsledky potvrdily předpoklad, že vysoká koncentrace zirkonia bude natolik kontrolovat vypařovací proces, že efekt kovů používaných k legování se prakticky neprojeví.

Vliv doprovodných prvků byl ověřen v plameni acetylen-kysličník dusný a u cínu a molybdenu i v plameni acetylen-vzduch. Vzhledem k zjištěným menším chybám je pro stanovení molybdenu výhodnější plamen acetylen-vzduch.

Navážka 0,5 g slitiny se rozloží v kyselině chlorovodíkové a fluorovodíkové, po rozpuštění se provede oxidace peroxidem vodíku. K vázání přebytečné kyseliny fluorovodíkové se přidá 0,5 g kyseliny borité pro potlačení ionizace 50 mg draslíku jako hydroxid draselný. Po úpravě objemu na 100 ml je roztok připraven ke stanovení všech 3 prvků.

Charakteristické koncentrace v plameni acetylen-kysličník dusný jsou 2,6 µg/ml Sn (286,3 nm) a 0,69 µg/ml Mo (379,8 nm), v plameni acetylen-vzduch 5,2 µg/ml Sn a 1,5 µg/ml Mo. Mez postřehu při stanovení niobu je 0,5 µg/ml (405,9 nm).

Správnost byla ověřena porovnáním výsledků s výsledky spektrofotometrických metod, které byly v laboratoři ÚJP vypracovány pro kontrolu zirkoniových slitin. U cínu a molybdenu je nalezená shoda velice dobrá, větší rozdíl je u niobu. Reprodukovatelnost stanovení byla vypočtena z 15 paralelně prováděných analýz, relativní směrodatné odchylky jsou následující : cín 0,61%, molybden 0,89% a niob 2,38%.

J. K o m á r e k , Přírodovědecká fakulta UJEP, Brno : Stanovení titanu AA spektrometrií.

Titan je jeden z prvků, které jsou obtížně stanovitelné AA spektrometrií, protože tvoří v plameni stabilní oxidy. Teplota plamene N₂O-acetylen je právě vhodná pro jeho stanovení. V literatuře je uvedena řada sloučenin, které zvyšují absorpci a tedy atomizaci titanu. Kromě anorganických kyselin HF, HClO₄, H₃PO₄, H₂SO₄ jsou to amonné soli (fluoridy, chloridy), Fe³⁺, Al³⁺ a řada dalších kationtů. Zvýšení absorpce Ti v prostředí kyselin je vysvětlováno tvorbou komplexů s Ti, zvýšení atomizace Ti jinými prvky především konkurenčních reakcí mezi Ti a jinými prvky ke tvorbě oxidů. V praktické analýze se tento většinou zvyšující vliv sloučenin kompenzuje přidávkou sloučenin, které vyvolávají silné zvýšení absorpce Ti (soli Al, Fe, NH₄F, HF, H₂SO₄) nebo kombinací těchto činidel (HF s Fe, H₂SO₄

s Fe). V této práci byl vyšetřen vliv jiných komplexotvorných činidel, především fenolů.

Byl potvrzen stupeň ionizace Ti a tedy nutný přísadek draselné soli na potlačení ionizace. Sledován byl rovněž vliv pozorovací výšky v plameni o různém poměru paliva a oxidovadla. Měření kalibračních křivek pro stanovení Ti za přítomnosti různých činidel bylo zjištěno u řady činidel značné zvýšení absorpce. Celkem bez vlivu jsou pyrokatechin, resorcin, pyrogallol, kyselina kojová, snižující vliv má kyselina šťavelová, citronová a askorbová. Značně zvyšující vliv mají kyseliny sulfosalicylová, pyrogallosulfonová, pyrogaloldisulfonová, chromotropová, 1-naftol-8-sulfonová, naftalen-1, 5-disulfonová a tiron. Závislost absorpce Ti na koncentraci aromatické sloučeniny vykazuje minimum, jehož poloha závisí na typu sloučeniny a na koncentraci Ti. U sulfosloučenin odvozených od naftalenu dochází ke zvýšení absorpce Ti z minima prudce, odvozených od benzenu pozvolně. Porovnáním sloučenin, které zvyšují absorpci, docházíme k závěru, že zvýšení absorpce nezpůsobuje vazba Ti na OH skupinu, nýbrž na sulfo skupinu. Přičemž vazba sulfo skupiny na aromatickém jádře je výhodná pro atomizaci Ti. Vliv těchto činidel byl porovnán s vlivem anorganických kyselin a byl sledován vliv různých prvků na atomizaci Ti za přítomnosti těchto činidel.

Použitím aromatických sulfosloučenin při stanovení Ti je tedy možné značně zvýšit citlivost stanovení a eliminovat různé rušivé vlivy při stanovení.

Odborná skupina automatické spektrometrie

Ve dnech 18. - 22.11.1974 byl uspořádán ve spolupráci s Domem techniky ČVTS v Ostravě III.kurz automatické spektrometrie. Kurz byl určen pro středně technické kádry, pracující ve spektrometrických laboratořích. Seznámil účastníky s teoretickými základy automatické spektrometrie.

Praktické aplikace zaměřené na vakuové a rentgeno-

vé automatické spektrometry byly předvedeny v kvantometrické stanici VZÚ NHKG, v laboratoři VÚ VŽKG a v nové kvantometrické stanici TŽ VŘSR. Po skončení kurzu bylo všem účastníkům předáno osvědčení. Kurzu se zúčastnilo 33 pracovníků. Kurz řídil Ing.Karel Kuboň.

Byly předneseny přednášky :

K. K u b o ň, Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava : Základy optické spektrometrie.

V. Š v a r d a l a , NHKG Ostrava : Automatické vakuové spektrometry.

K. K u b o ň , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava : Vzorkování pro optické spektrometry.

K. C h a r v á t , VŽKG, Ostrava : Metodika pro rozbory oceli a surového železa.

B. P o l j a k , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava : Metodika pro rozbory oceli a surového železa na vakuových optických spektrometrech.

M. H a r t l , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava : Metodika pro rozbory nekovových materiálů na optických spektrometrech.

J. J á n o š í k , VŽKG , Ostrava : Základy rentgenové spektrometrie.

R. F i e r l a , VŽKG, Ostrava : Automatické rentgenové spektrometry.

Z. E r s e p k e , Výzkumný a zkušební ústav NHKG, Ostrava : Metodika pro rozbory nekovových materiálů rentgenovým spektrometrem.

V. Š v a r d a l a , NHKG, Ostrava : Automatické vyhodnocování výsledků.

J. J á n o š í k o v á , Výzkumné ústavy VŽKG, Ostrava : Možnosti použití přímo registrujícího spektrálního analyzátoru DSA-240 k analýze nízko a středně legovaných ocelí.

Odborná skupina rentgenospektrální analýzy

12. pracovní schůze se konala dne 20. listopadu 1974 v Ústředním ústavu geologickém v Praze.

Schůzi řídila RNDr. Jaroslava Waňková CSc.

Byly prosloveny přednášky :

J. W a ň k o v á , Výzkumný ústav anorganické chemie, Ústí nad Labem : Referát ze zasedání expertů zemí RVHP v oboru rentgenstrukturních a rentgenspektrálních přístrojů, Leningrad, 10.-14.9.1974.

Přednášející seznámila přítomné s průběhem jednání a závěry vyplývajícími ze zasedání, kterého se účastnily delegace SSSR, NDR a ČSSR v závodě Burevěstnik v Leningradě, týkajícího se současného stavu a perspektiv výroby rentgenstrukturních a rentgenspektrálních aparatur.

Byl podán podrobný přehled o typech přístrojů vyráběných v současné době v NDR a SSSR v oboru rentgenové spektroskopie a byly probrány podrobně jejich technické parametry.

Posluchači byli seznámeni s perspektivními směry vývoje závodů Karl Zeiss Jena NDR a Burevěstnik SSSR do r. 1980.

Diskuse se týkala otázek rentgenspektrálních trubice, počítačů, dále otázek spojených s plánováním těchto investic a s možností aktivní účasti ČSSR na tvorbě technických parametrů perspektivně vyráběných přístrojů z oboru rentgenové spektroskopie.

J. J u n a , Ústřední ústav geologický, Praha : Korekce matričního efektu v RTG spektrometrii.

V přednášce byla porovnána metoda vnitřního standardu, kdy se intenzita fluorescenčního záření sledovaného prvku normalizuje porovnáním s intenzitou záření vnitřního standardu, s metodou normalizace srovnáním intenzity fluorescenčního záření prvku s intenzitou rozptýleného záření spojitého spektra RTG trubice.

V úvodu byly rozebrány teoretické vztahy, udávající-

cí intenzitu fluorescenčního i rozptýleného záření. Zavedením λ_{eff} bylo dosaženo podstatného zpřehlednění výsledků, aniž se tím zavádí další aproximace. I když λ_{eff} závisí na matici a je tedy obecně známá, je možné z obecných vztahů stanovit podmínku, kdy vnitřní standard kompenzuje změny matrice optimálně a kdy lze očekávat odchylky od správných hodnot.

Dále bylo ukázáno, že kompenzace matričního efektu normalizací na pozadí nemůže obecně spolehlivě kompenzovat vliv matrice, je však použitelná v případě, že Z_{eff} - vhodně definované - jednotlivých vzorků se příliš nemění.

Obě metody byly porovnány na experimentálním materiálu. Především bylo ukázáno, že ani poměr linie vnitřního standardu k jeho pozadí není konstantní, že se v extrémních případech mění až 1 : 2. S tímto poměrem však koreluje i poměr skutečného obsahu prvku ve vzorku k hodnotě, získané metodou normalizace na pozadí. Hodnoty, získané metodou vnitřního standardu se dobře shodují s hodnotami doporučenými.

Experimentálně jednoduchá a atraktivní metoda normalizace na pozadí tedy vyžaduje velmi pečlivou kontrolu, že Z_{eff} měřeného souboru vzorků (včetně kalibračních) se nemění a tento předpoklad neustále prověřovat - např. statisticky.



MOLEKULOVÁ SEKCE

Odborná skupina infračervené spektroskopie s vysokým rozlišením

Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV uspořádal ve dnech 2. - 6. září 1974 III. mezinárodní seminář o infračervené spektroskopii vysokého rozlišení. Seminář, který byl také zahrnut do programu akcí odborné skupiny, se konal v Domě vědeckých pracovníků ČSAV v Liblicích u Mělníka.

Seminář byl zahájen úvodními přednáškami zakladatele mikrovlnné spektroskopie molekul prof. W. Gordyho (USA) o spektroskopii ve vzdálené infračervené oblasti pomocí mikrovlnné techniky, dr. O. Tumanova (SSSR) o nelineární laserové spektroskopii bez Dopplerova rozšíření a prof. L. Henryho (Francie) o pokrocích infračervené spektroskopie vysokého rozlišení. Dalších 36 přednášek bylo předneseno účastníky v těchto sekcích: technika infračervené, submilimetrové a laserové spektroskopie vysokého rozlišení, teorie vibračně rotačních spekter molekul, spektroskopie molekul s velkými amplitudami vibrací a analýza vysoce rozlišených infračervených a Ramanových spekter molekul. Semináře se účastnilo celkem 67 vědeckých pracovníků ze 14 zemí.

Ze spontánního ohlasu u účastníků lze soudit, že náš seminář si udržuje vysokou odbornou úroveň a je označován za unikátní pokud jde o vytvoření přátelské a tvůrčí atmosféry během celého jednání (tentokrát k tomu přispělo i krásné prostředí liblického zámku). Vysokého ocenění se např. dostalo

v úvodní přednášce prof. Gordyho výsledkům sovětské skupiny dr. A. F. Krupnova v oblasti submilimetrové spektroskopie. Pro nás je toto ocenění zvláště potěšující vzhledem k tomu, že A. F. Krupnov poprvé přednesl svoje unikátní výsledky na mezinárodním fóru na II. semináři v Praze v roce 1972 a oddělení molekulové spektroskopie Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. H. ČSAV je jediným pracovištěm vůbec, které má vytyčeny konkrétní úkoly společného řešení problémů s Krupnovovou skupinou v rámci programu RVHP.

Pracovníci Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. H. ČSAV přednesli na semináři celkem 6 přednášek, věnovaných zejména teorii a analýze spekter s velkými amplitudami vibrace a zorganizovali exkursi do infračervené laboratoře ústavu, kde předvedli čs. infračervený spektrometr vysokého rozlišení v chodu.

Program a abstrakta všech přednášek jsou k dispozici v oddělení molekulové spektroskopie Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. H. ČSAV v Dejvicích, Flemingovo nám. 2. Některé význačné přednášky budou postupně zveřejněny v Bulletinu ČSSS.

Odborná skupina spektroskopie pevného stavu

Ve dnech 22. - 26. září 1974 byla ve spolupráci s VŠCHT katedrou anorganické chemie uspořádána ve Zvíkovském Podhradí letní škola "Vibrační spektroskopie krystalů", které se zúčastnilo 36 pracovníků. Cílem této akce bylo zejména rozšířit znalosti pracovníků laboratoří infračervené a Ramanovy spektroskopie v problematice spektroskopie krystalických látek a prodiskutovat aktuální otázky rozboru spektrálních dat. Posluchačům byla ucelenou formou předvedena fundamentální problematika rozboru vibračních spekter krystalů včetně fyzikálních hledisek interpretace.

Byly předneseny přednášky :

P. K l í m a , Tesla VÚST A.S.Popova, Praha :
Geometrie krystalového uspořádání a klasifikace vibrací v krystalu na podkladě jejich symetrických vlastností.

K. S a r k a , Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava : Vibrační spektra molekul a jejich vztah ke kmitům krystalu.

I. G r e g o r a , Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha : Úvod do mřížkové dynamiky.

A. V a š k o , Ústav radiotechniky a elektroniky ČSAV, Praha : Optické konstanty a reflexní spektra krystalů.

M. P i s á r č i k , Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava : Infračervená a Ramanova spektra krystalů.

L. N o v á k , Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Vibrační spektra reálných krystalů.

Odborná skupina elektronové spektroskopie a fotochemie

2.pracovní schůze se konala dne 22.října 1974 v Pardubicích. Schůzi řídil Ing.Miloš Nepraš CSc.

Bylo debatováno o nových moderních metodách elektronové spektroskopie, zvláště s ohledem na digitalizaci a sběr dat na děrnou pásku. Pozornost zaujalo zařízení pro zábleskovou spektrofotometrii na VŠCHT.

Byla uskutečněna prohlídka spektrální laboratoře VÚOS Rybitví a spektrální laboratoře katedry organické technologie VŠCHT Pardubice.

Odborná skupina Mössbauerovy spektroskopie

7.pracovní schůze se konala dne 14.listopadu 1974 v n.p. Geofyzika v Brně.

Schůzi řídil Ing.Jozef Sitek CSc.

Byly předneseny přednášky :

J. L i p k a , Katedra jadrovej fyziky a techniky EF SVŠT, Bratislava : Informácia o Medzinárodnej konferencii o aplikácii Mössbauerovej spektroskopie v Bendore.

V dňoch 2. až 6.septembra sa vo Francúzsku konala Medzinárodná konferencia o aplikácii Mössbauerovho efektu. Organizátorom konferencie bolo Laboratorium tuhých látok Nancy-Cedex. Konferencia mala 225 účastníkov z 29 krajín, z toho 14 zástupcov zo 6-tich socialistických krajín.

V priebehu konferencie odzneli 4 prehľadové referáty na témy :

1. Výpočet elektrónovej hustoty
2. Relaxácia 3d a 4f elektrónov v kovoch a zliatinách
3. Elektronová štruktúra biomolekúl
4. Efekty kovalencie v hyperjemných interakciách

Ďalej 10 sumárnych referátov na témy : Spinové a nábojové fluktuácie v tuhých látkach, Experimenty s vysokým magnetickým poľom, Amorfné látky, Problémy textúry, Jahn-Tellerov efekt, Infračervená a Ramanova spektroskopía a jej vzťah k Mössbauerovej spektroskopii, Objemová závislosť hyperjemných interakcií, Využitie ME v umení, Štruktúrne poruchy mriežky.

Štyri referáty boli o nových aplikáciách Mössbauerovho efektu :

1. Otázka Gaserov
2. Rádiofrekvenčná Mössbauerova spektroskopía
3. ME vysokej rozlišovacej schopnosti na ^{73}Ge
4. Mössbauerove experimenty bez konvenčných zdrojov

140 príspevkov ostatných autorov bolo rozdelených do 20-tich sekcií. Po prvýkrát boli tieto referáty prezentované systémom tzv. "reportérov". Reportér resp. vedúci sekcie

uviedol spoločne všetky príspevky a účastníci mali v priebehu 5 minút referovať o podstatných výsledkoch svojej práce. Tento spôsob sa veľmi osvedčil, pretože je možno prezentovať v danom ešte viac príspevkov.

Zborník všetkých referátov bude publikovaný v časopise : Journal de Physique. V auguste roku 1975 bude 6. Medzinárodná konferencia v Krakove (PLR). V roku 1976 bude konferencia pravdepodobne v Grécku.

J. D l o u h á , Matematicko-fyzikální fakulta Karlovy university, Praha : Užití Mössbauerova jevu ke studiu dynamiky krystalové mříže.

Kmitové vlastnosti krystalu se projevují v mössbauerovské spektroskopii v hodnotách dvou veličin : intenzity Mössbauerovy linie a teplotního posuvu jejího středu. Vzhledem k vysoké rozlišovací schopnosti Mössbauerova jevu se proto předpokládalo, že tento jev umožní určování kmitového spektra regulárních i neregulárních krystalů a amorfních látek, jakož i disperzních relací. Ukázalo se však, že fononové linie jsou příliš široké ve srovnání s rozlišovací schopností Mössbauerova jevu ($\sim 10^{-8}$ eV), takže u regulárních krystalů nepřináší mössbauerovská spektroskopie lepší výsledky než difrakce λ -prvků a proti nepružnému koherentnímu rozptylu pomalých neutronů v krystalu je dokonce v nevýhodě. Podobně vzhledem ke krátké době života fononů je i pro určení disperzních relací vhodnější neutronografie.

Poměry se změny ve prospěch Mössbauerova jevu, jakmile se atomy, jejichž kmity sledujeme, nějak liší od ostatních atomů v krystalu (povrchové atomy, příměsi). Protože Mössbauerův jev postihuje jen takový atom, jehož jádro emituje záření dané frekvence, poskytuje hodnota intenzity Mössbauerovy linie i teplotního posuvu informace o dynamice tohoto atomu. Zdá se, že zatím neexistuje lepší cesta, jak určit silové konstanty mezi příměsí a hostícím krystalem. Interpretaci měření v kubických krystalech umožňuje Mannheimova teorie.

Analýzou mössbauerovského spektra slitin lze dále

zjistit, jaké polohy obsazují γ -aktivní atomy.

U atomů na povrchu krystalu se dá užitím podložky z jiného materiálu vyloučit vliv masivního krystalu a studovat čisté povrchové efekty. Mössbauerův jev obráží i anisotropii dynamiky mříže.

Značný přínos představuje mössbauerovská spektroskopie při studiu fázových přechodů, zejména 2. druhu. Umožňuje jednak jejich přesnou lokalizaci, dále sledování změn fononového spektra při nich a zkoumání koexistence fází. Tím se Mössbauerův jev uplatňuje i při studiu změn fází v technických materiálech. Výhodou Mössbauerova jevu je, že poskytuje informace i o fázových přechodech, které probíhají jen v malých částech vzorku (např. zrnech velikosti několika desítek Å).

Široké možnosti využití Mössbauerova jevu v oblasti dynamiky krystalové mříže nebyly dosud realizovány. Důvodem je jednak skutečnost, že většina experimentátorů užívá teorie jednoatomové mříže i při studiu dvouatomových a složitějších mříží, jednak nedostatek vhodných polofenomenologických modelů kmitů krystalu.

Odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie

2. pracovní schůze se konala dne 26. listopadu 1974 v Ústavu fyzikální metalurgie ČSAV v Brně.

Schůzi řídil doc. dr. Jaro Komenda CSc

Byly předneseny přednášky :

A. T k á č , Ústav chemické techniky ChTF SVŠT, Bratislava : Radikálové redoxmechanizmy v koordinačnej sfére chelátov prechodných kovov študované metódou EPR.

Metódou EPR spektroskopie sa v nepolárnych rozpúšťadlách študoval medzimolekulový prenos nespáreného elektrónu $d \rightarrow p$ z nízkospinového chelátu prechodného kovu na $-O-O-$ väzbu organických peroxidov. U tohoto typu oxidačne adičných reakcií

vznikají koordinované peroxy a alkoxy radikály na nejvyšším oxidačnom stupni prechodného kovu. Hybnou silou reakcií je snaha dosiahnuť stabilnú 18-elektrónovú konfiguráciu valenčných elektrónov. Následná redukčne-eliminačná reakcia uzatvára medzi rôznymi stupňami prechodného kovu katalytický kruh, čo vedie k rýchlemu nestechiometrickému rozkladu peroxidov. V prítomnosti alkylovov redukuje sa prechodný kov vnútroelektrónovým $d_p \rightarrow d$ prenosom elektrónu z ligandu na centrálny kov za vzniku ligan-dového voľného radikálu.

U všetkých systémov, ktoré boli študované ($\text{Cu}^{\text{II}}\text{d}^9$, $\text{Ni}^{\text{I}}\text{d}^9$, $\text{Co}^{\text{II}}\text{d}^7$, $\text{Fe}^{\text{III}}\text{d}^5$, $\text{Mn}^{\text{IV}}\text{d}^3$, $\text{Ti}^{\text{III}}\text{d}^1$), chová sa prechodný kov ako voľný radikál s nespáreným elektrónom, ktorý zostáva zachovaný tak pri oxidačných ako aj pri redukčných reakciách.

Poukazuje sa na širokú možnosť aplikácie stabilizovaných peroxy a alkoxy radikálov pri výskume katalýzy, reaktivity organických látok a v biochémií.

J. P i l a ř , Ústav makromolekulární chemie ČSAV,
Praha : EPR studium polymerních systémů.

Interpretaci EPR spekter práškových polymerních systémů na základě klasického spinového hamiltoniánu lze získat kromě nepříliš přesných informací o struktuře polymerních radikálů a změnách jejich koncentrací jen velice chabé informace o fyzikálních parametrech studovaných systémů. Tuto situaci ilustrují výsledky získané autorem a spolupracovníky v ÚMCh při studiu polymerních radikálů připravených vibračním mletím polyglykolmetakrylátu za nízkých teplot a jejich interakcí s kyslíkem. Podrobnější informace o fyzikálních parametrech polymerních systémů lze získat studiem polymerů značených spin-labely nitroxidového typu. Analýzou tvaru spekter těchto nitroxidů na základě teorií vypracovaných Freedem a spolupracovníky pro oblasti výměnného zúžení a pro oblasti pomalých pohybů, lze získat cenné informace o korelačních časech charakterizujících pohyby segmentů polymerního řetězce v roztocích i v pevné fázi.

J. K o m e n d a , Přírodovědecká fakulta UJEP,
Brno : Využití kvantově-chemických výpočtů při interpretaci EPR spekter.

Charakteristickými znaky EPR spektra je jeho poloha určená hodnotou g -faktoru a charakter štěpení (počet linií a hodnoty štěpících konstant). Zatímco počet a relativní intenzity linií lze jednoduše odvodit z počtu a druhu atomů, s nimiž je v interakci nepárový elektron, hodnoty štěpících konstant souvisí se spinovými populacemi na jednotlivých atomech. Z obecné Karplus-Fraenkelovy rovnice, vystihující pí-sigma spinovou polarizaci lze pro případ štěpení od jednotlivých jader či atomových skupin odvodit speciální vztahy, které lze často redukovat na jednoduchou lineární úměrnost McConnella typu. V přednášce je podán přehled jednotlivých korelačních rovnic s konkrétními hodnotami příslušných konstant, jsou probrány i případy iontových asociátů.

Pro korelaci hodnot g -faktorů s kvantově-chemickými charakteristikami molekul získanými na úrovni jednoduché HMO metody byla, vycházejíc z původního Stoneho vztahu platícího pro radikály aromatických uhlovodíků a vztahů odvozených Kawamurou, odvozena obecná rovnice umožňující výpočet příspěvků jednotlivých atomů k posunu g -faktoru na základě vypočtených orbitálních energií orbitu obsahujícího nepárový elektron a opravných Hückelovských parametrů jednotlivých atomů, jakož i spinových hustot na těchto atomech. Tento vztah byl testován ve skupinách aromatických uhlovodíků, jejich methylderivátů, orto- a parachinonů, jejich methylderivátů, jakož i chlor- a fluorderivátů těchto látek. Pro jednotlivé druhy atomů byly odvozeny hodnoty korelačních konstant, universálně použitelné. Řádové rozdíly mezi těmito konstantami pro různé druhy atomů jsou v soulase s řádově rozdílnými konstantami spin-orbitální interakce, jak předpovídá odvození korelační rovnice. Z posunu g -faktoru při tvorbě iontových asociátů lze naopak určit ovlivnění coulombického integrálu heteroatomu.

Odborná skupina hmotové spektrometrie

6. pracovní schůze se konala dne 26. listopadu 1974 v Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV v Praze.

Schůzi řídil RNDr. Zdeněk Herman CSc.

Byly předneseny přednášky :

Z. P r á š i l , Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioisotopů, Praha : Statistická teorie hmotových spekter a rozpad excitovaných molekul a iontů.

Hmotová spektra (HS) jsou výsledkem značně složitěho kinetického děje a zastoupení jednotlivých iontových fragmentů v HS se dá vypočítat na základě představ vycházejících z teorie absolutních reakčních rychlostí, zejména pak z moderní teorie monomolekulárních reakcí, jak ji vypracovali Rice, Ramsperger, Kassel a Marcus (teorie RRKM). Jako žádná teorie reakční kinetiky, ani teorie RRKM nevysvětluje tvorbu HS do všech podrobností, ovšem tvoří vhodný soubor představ, z něhož bude pravděpodobně vycházet jakákoliv budoucí teorie HS. Základní myšlenková koncepce statistické teorie HS spočívá na těchto předpokladech :

1. V časovém rozmezí trvajícím asi 10^{-16} - 10^{-15} s dojde k interakci mezi narážejícím elektronem a elektronovým obalem terčové polyatomické molekuly, při čemž část energie elektronu se přenese na tento elektronový obal a spotřebuje zčásti na uvolnění elektronu a na jeho kinetickou energii a zbývající část se v molekule uloží jako její elektronická a vibrační excitační energie.
2. Takto vzniklý molekulární ion má relativně dlouhou dobu života (10^{-12} - 10^{-11} s), takže může dojít k několika důležitým procesům : a) veškerá přítomná elektronická excitační energie se procesy vnitřní konverze a intersystém crossingu přenese na vnitřní stupně volnosti, tj. na vibrace a vnitřní rotace; b) předpokládáme, že během této doby je veškerá tato energie randomizována, tj. nahodile rozložena mezi všechny pertinentní stupně volnosti. Znamená to, že předpokládáme volný tok energie

mezi těmito stupni volnosti a že všechna možná rozdělení energie jsou stejně pravděpodobná (jedině tento předpoklad umožňuje použít statistických zákonitostí).

3. Jestliže se v některém stupni volnosti nahromadí dostatečné množství energie, dojde k monomolekulárnímu rozpadu, jehož výsledkem mohou být dva (nebo i více) fragmentů nebo přechod do jiné konfigurace původního molekulárního iontu. U polyatomických molekul bude existovat velké množství těchto reakčních kanálů a bude záležet především na energetických podmínkách, v jakém poměru si budou jednotlivé kanály konkurovat. Tento poměr závisí na poměru příslušných rychlostních konstant, pro které RRKM teorie odvozuje výraz : $k(E) = \alpha G^\ddagger (E - E_0) / h N(E)$, kde α je degenerace reakčního kanálu, h je Planckova konstanta, $G^\ddagger (E - E_0)$ je součet všech možných stavů přechodového stavu mezi E_0 (energetickým prahem reakce) a excitační energií E , a $N(E)$ je počet stavů původní molekuly při energii E / $N(E)$ je spojitou aproximací degenerace $W(E)$ stavu o energii E . Přesný výpočet veličin G a N je příliš časově náročný i pro největší počítače a proto bylo nutno nalézt vhodné aproximativní vztahy. Nejobecnější metoda je založena na výpočtu $N(E)$ pomocí inverzní Laplaceovy transformace příslušné partiční funkce. Používá se tzv. metody nejstrmějších sestupů (method of steepest descents), kterou lze použít i pro molekulární systémy aproximované souborem anharmonických Morseových oscilátorů (dá se použít pro jakýkoliv systém, pro nějž můžeme napsat partiční funkci a její logaritmické derivace).

Rozpad fragmentů první generace do dalších generací je pak nejvíce ovlivňován tím podílem vnitřní energie, který zůstává v daném fragmentu a je tudíž určován tzv. fluktuací energie mezi ionizovaným a neutrálním fragmentem. Také tato fluktuace se dá vypočítat pomocí výrazu, v němž vystupují veličiny N a G . Totéž platí i pro rozpad z druhé do třetí generace.

Z dosud uvedených předpokladů lze vypočítat $k(E)$ a tudíž výsledek rozpadu molekulárního iontu, excitovaného do určitého stavu o energii E (např. po době 10^{-5} s, což je doba, kterou má v hmotovém spektrometru molekulární ion k dispozici pro svůj rozpad, aby jeho výsledek byl zaregistrován v HS).

V běžných hmotových spektrometrech nemáme ovšem možnost měřit výsledek rozpadu při excitaci do určitého stavu E , protože se tvoří molekulární ionty s nějakým, většinou neznámým rozdělením vnitřní energie, přes něž je nutno vypočtené závislosti průměrovat a integrovat, aby bylo možno vypočíst zastoupení daného iontu v HS. Tím je ovšem značně ztížena možnost porovnání výsledků teoretického výpočtu s experimentálním HS. Proto se porovnání provádí s tzv. rozpadovými grafy ("breakdown graphs"), které jsou sestavovány z HS získaných při rozpadu molekuly ionizované přenosem náboje.

Největším nedostatkem teorie je skutečnost, že výsledek výpočtu závisí velmi podstatně na přesnosti stanovení potřebných molekulárních parametrů (normálních vibrací, momentů setrvačnosti, na modelu přechodového stavu, atd.) a to jak pro molekulární ion, tak i pro přechodový stav, pro nějž jsme nuceni potřebné hodnoty pouze odhadovat.

Popsaná teorie rozpadu excitovaných molekulárních iontů je samozřejmě aplikovatelná i na rozpad excitovaných neutrálních molekul a proto se těchto výsledků dá s malými úpravami použít i v teorii fotochemických a radiačně-chemických reakcí v plynné fázi, pro popis reakcí probíhajících při elektrických výbojích v plynech, při excitaci molekul v reakcích iontů s molekulami, při disociativním záchytu elektronu a pod.

V. H a n u š , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV, Praha : Popis a funkce hmotového spektrometru JEOL D 100 spojeného se systémem pro automatické zpracování dat.

Spektrometr JEOL D 100 je konstruován podle principu Matsudy (optika virtuálního obrazu, se zmenšením šířky obrazu štěrbinou na štěrbině detektoru), s poloměry $R_{elst} = R_{mgn} = 150$ mm dosahuje rozlišovací schopnosti 10 tisíc (10% údolí) a přesnosti určení hmoty metodou přizpůsobení píků 5 - 10 ppm. Vakuový systém je chráněn a ovládán převážně pneumatickými a elektrickými ventily, plynový chromatograf je připojen obohacovačem typu Ryhage-Becker, značkovač škály hmot má nepřes-

nost menší než 0,3 j. Systém pro automatické zpracování dat obsahuje programy pro nízké i pro vysoké rozlišení.

Spektrometr byl účastníkům schůze předveden v chodu.



ZPRÁVY Z KOMISÍ

Přístrojová komise

Psychiatrická léčebna, biochemická laboratoř

181 02 Praha 8, Ústavní 91 (MUDr. Turek)

potřebuje interferenční filtr pro stanovení lithia
(ϕ 5 cm, propustnost 671 nm) buď k zapůjčení nebo odprodeji.

Ústav teoretických základů chemické techniky ČSAV

165 02 Praha 6 - Suchbátův (Ing. Schraml - telefon 329 441)

nabízí k odprodeji kompletní 60 MHz NMR spektrometr Tesla
BS 477 (s protonovou stabilizací)

LIAZ n.p., odd. podnikové metalurgie

466 05 Jablonec nad Nisou

prodá fotoelektrický stilometr FES 1 sovětské výroby, včetně
speciálních laboratorních stolů. Cena 92 613 Kčs za přístroj.

Ústav pro soudní lékařství

128 21 Praha 2, Studničkova 2

přijme pracovníka - vysokoškoláka, který má zájem o spektrální
metody. Nástup možný ihned.

RECENZE

K. B i č o v s k ý , Výzkumný ústav ČKD Praha :
Podíl Československé socialistické republiky na výzkumu a svě-
tové produkci referenčních materiálů.

Všechna důležitá odvětví národního hospodářství
vyžadují stálou kontrolu chemického složení zpracovávaného ma-
teriálu. Každou vteřinu proběhne v našich laboratořích jedno
stanovení. Plynulost tohoto mohutného toku informací a využití
stamilionových laboratorních investic záleží na jedné zdánlivé
maličkosti : tou jsou referenční materiály.

Ano, referenční materiály, s nimiž většina z nás
se denně setkává, s jejichž zajišťováním a přípravou prožili
mnozí z nás těžké chvíle, ty tvoří dnes základ provozní analy-
tiky.

Čemu vděčí referenční materiály za svůj nynější
význam ?

Je to zásadní změna charakteru průmyslové analyti-
ky, jejímiž svědky a účastníky jsme v posledních letech byli.

Požadavky na množství a kvalitu rozborů výrazně
vzrostly. Uvedu-li jako příklad změny v naší laboratoři od in-
stalace prvního kvantometru Cameca, tedy za posledních 15 let,
najdou v něm mnozí kolegové obdobu svých vlastních zkušeností.
V laboratoři, zajišťující servis pro pražské závody ČKD, vzrostl
za tuto dobu počet stanovení na 250 000 ročně, to je trojnásob-
ně. Průměrné trvání analýzy kleslo na pětinu a požadavek na
přesnost a počet stanovených prvků v jednom vzorku se zdvojná-

sobil.

Takové požadavky si vynutily přechod od klasických metod roztokových k fyzikálně chemickým a fyzikálním (většinou z pevného vzorku), jako je spektrometrie. Od postupů manuálních se přechází k automatizovaným přístrojům.

Kalibrace klasických metod, jako gravimetrie, mohla vycházet z etalonů základních metrologických veličin, tedy etalonů hmotnosti. Pro fyzikálně chemické metody bylo teoreticky možno použít etalony těch odvozených veličin, které indikují změny koncentrace. To je ale prakticky uskutečnitelné jen tehdy, když korelace mezi koncentrací a touto veličinou je jednoznačná, stálá a snadno stanovitelná.

To se vyskytne bohužel jen v ojedinělých případech. Ve všech ostatních pak jedinou možností rychlé a spolehlivé kalibrace dají RM. Jestliže tedy v klasické době analytiky byly RM výhodné pro občasné ověření, jsou dnes nepostradatelné pro pravidelnou kalibraci.

RM je v podstatě rovněž metrologický prostředek - pro měření vlastností hmoty. Podobnost RM s ostatními metrologickými prostředky - etalony jako pověstný platinový metr - není velká a snad proto vrcholné metrologické organizace zachovávaly tak dlouho k RM zdrženlivý odstup. Teprve pod nátlakem výzkumných a průmyslových pracovníků se v minulém roce Mezinárodní úřad pro míry a váhy a Mezinárodní organizace legální metrologie rozhodly RM do své rodiny adoptovat a následovat tak některé národní organizace. Nu a protože RM je už 70 let, což je jistě věk pro adopci víc než zralý, bude s tím asi ještě hodně potíží. Zatím se zpracovává křestní list - tedy jednotný název a definice. Název RM nahrazuje dosavadní synonyma, jako standardní vzorek, srovnávací vzorek, analytický normál, chemický etalon apod. Nutno poznamenat, že podobný zmatek existoval i v mnoha dalších jazycích, což rešeršní pracovníci často nespisovně komentovali.

Definice, odsouhlasená minulého roku na konferenci Mezinárodního úřadu pro míry a váhy a Mezinárodní organizace legální metrologie ve Washingtonu říká ve své zjednodušené formě, že RM je dostatečně charakterizovaný materiál s defino-

vanou látkovou vlastností, jejíž hodnota je oprávněnou autoritou zaručena. Je určen k ověřování a kalibraci metod a přístrojů a ve vymezeném čase a území dostupný všem uživatelům.

Podle druhu atestované látkové vlastnosti se dělí RM na 3 třídy :

na RM technologických vlastností, fyzikálních vlastností a RM složení. RM technologických vlastností, jako je třeba tvrdost, enzymatická aktivita apod. leží mimo rámec naší činnosti. RM fyzikálních vlastností - třeba čisté kovy pro realizaci teplotní stupnice apod. už zahrnují i ty se kterými se setkávají zejména kolegové z molekulové sekce, ale někdy i ze sekce atomové. Jako příklad mohu uvést RM frekvence pro IR spektrometrii - inden, metan, CO, NH₃, nebo RM pro faktor spektroskopického rozštěpení v EPR - ZnO dopovaný dvojmocným Mn. Nakonec i jeden z prvních RM připravených ve spolupráci členů naší společnosti - čisté Fe - byl používán jako frekvenční RM. Při řazení těchto RM do třídy nás nesmí mýlit to, že je u nich určeno chemické složení. Složení je zde pouze nositelem měřené vlastnosti. U RM třetí třídy - RM složení - je pak chemické složení vlastností měřenou - ať už je to hmotnostní koncentrace prvků, sloučeniny, radikálu, isomeru nebo i fyzikálně definované strukturální složky, jako je třeba grafitický uhlík v šedé litině. Touto třetí skupinou se budu dále výhradně zabývat.

Je užitečné všimnout si blíže jednotlivých částí definice. Co znamená "dostatečně charakterizovaný"? Víme, že výsledek měření fyzikálně chemických metod závisí kromě na koncentraci stanovované složky i na řadě dalších vlastností materiálu, jako matriční efekt, nehomogenita atd. "Dostatečná charakterizace" poskytuje proto informaci pro rozhodnutí, zda je určitý RM vhodným kalibračním prostředkem pro zvolenou metodu a dané materiály.

Oprávněnou autoritou je míněn Mezinárodní úřad pro míry a váhy nebo Mezinárodní organizace legální metrologie, jejich národní pobočky a instituce jimi pověřené nebo schválené.

Druhá část definice o dostupnosti RM je velmi důležitá pro praxi : RM, který není plynule dostupný po dobu alespoň několika let a pro všechny uživatele, neplní svou me-

trologickou úlohu a proto definici nevyhovuje.

O uplatnění RM v analytickém procesu rozhoduje několik základních vlastností. Ty má znát nejen výrobce, ale i analytik uživatel, chec-li při jejich volbě zaujímat aktivní a fundované stanovisko. Pokusím se proto tyto vlastnosti krátce charakterizovat.

První z těchto vlastností je koncepční řešení, které se dělí na fyzikální a chemické. Fyzikální část koncepce zahrnuje tvar vzorku, strukturu a další fyzikální vlastnosti podle předpokládané analytické metody pro níž je RM určen. Chemická část koncepce je podmíněna úlohou RM v analytickém procesu. Pro občasné ověření chodu přístroje je zapotřebí jediný vzorek. Pro kalibraci, což je dnes převládající způsob užití, je základní jednotkou celá sada a pro tu se vypracovává koncepce chemického složení. Ta pak sestává z následujících kroků :

1. volba zaručovaných prvků
2. jejich rozsah
3. jejich odstupňování
4. jejich vzájemné prokombinování
5. počet RM v sadě

Prakticky můžeme koncepční řešení sledovat na nové sadě litin VÚ ČKD. Bylo zvoleno 20 zaručovaných prvků - z toho 12 základních C, Mn, Si, P, S, Ni, Cr, Mo, V, Cu, Ti, Mg a 8 nečistot, které nejsou dnes ještě požadovány pravidelně, ale perspektivně se s jejich provozním stanovením počítá : Ti, Al, Zr, As, Sn, Sb, Co, W.

V druhém kroku byly rozsahy voleny tak, aby u všech běžných materiálů překrývaly rozsahy normované - tak, aby při vyhodnocování nebyla nutná extrapolace. Je tedy třeba Si od 0,2 do 3,5 %, Mn od 0,1 do 1,8 atd.

V dalším kroku se pro odstupňování volil kompromis mezi geometrickou a aritmetickou řadou - takové řešení umožní i dostatečné obsazení v případě, že se používá jen část křivky blíže nižším obsahům.

Pro vzájemné prokombinování bylo třeba vyhnout se kombinacím vyšších obsahů prvků vzájemně se spektrálně ovliv-

ňujících. Celkově se sledoval konstantní obsah základního matričního prvku - železa - a konstantnost grafitizačního koeficientu jako hlavního určujícího činitele struktury.

Pátý a poslední krok, počet členů sady vyplynul z výše uvedených koncepčních kroků srovnáním s reálnými technologickými možnostmi. Došlo se tak k celkovému počtu členů sady 9.

Další základní vlastností RM je interval spolehlivosti atestované hodnoty. V řadě publikací, zabývajících se správností analytických metod se s naprostou samozřejmostí pokládá atestovaná hodnota RM za absolutně správnou. Toto stanovisko lze přijmout za možnou aproximaci tam, kde chyba ověřované metody je vysoká. Při kalibraci vysoce přesných metod - a o to nám jde - nelze rozdíl mezi správnou a atestovanou hodnotou zanedbat. Na této chybě se především podílí rozdíl mezi zaokrouhlenou atestovanou hodnotou a nezaokrouhleným průměrem stanovení. Další zdroje chyby vyplývají z rozptylu jednotlivých analýz a systematických chyb použitých metod. Analýz RM se běžně účastní počet laboratoří a stanovení se několikanásobně opakují. Rozptyl proto atestovanou hodnotu obvykle podstatnou měrou neovlivní. Jinak je tomu se systematickými chybami metod. Pouze při určení atestované hodnoty pomocí více metod principiálně nezávislých je určitá pravděpodobnost eliminace jednotlivých systematických chyb. Tam, kde je atestovaná hodnota výsledkem řady stanovení jedinou metodou, je zatížena plnou systematickou chybou této metody. Bohužel, pouze málo výrobců poskytuje v atestu informaci dostatečnou pro posouzení této otázky. Mezi ně patří třeba NBS Washington a BAS Middlesbrough.

Třetí základní vlastností jsou parametry, na něž definice RM pamatuje slovy "dostatečně charakterizovaný". Jsou to zejména matriční efekt a nehomogenita. Matriční efekt je působen jednak vlivem ostatních prvků, jednak strukturou a dalšími fyzikálními parametry. Pro úvahy o vlivu ostatních prvků poskytují většinou atesty dostatečnou informaci : buď je materiál analyzován kompletně, nebo je další složení udáno alespoň informativně. O fyzikálním stavu, případně o technologii, jejímž je tento stav důsledkem, jsou informace vzácnější. Praktické ověření funkce RM přímo v analytickém procesu je zde ob-

vykle jedinou cestou, jak nahradit nedostatečnou charakterizovanost.

Nehomogenita RM může rovněž výrazně ovlivnit spolehlivost kalibrace. V podstatě lze říci, že každý materiál je nehomogenní, zkoumáme-li jeho dostatečně malé části. Z toho plyne, že u RM by mělo být uvedeno, jaké je nejmenší množství pro jednotlivá stanovení, při kterém se již nehomogenita významně neprojeví. Tedy např. u sypkých vzorků minimální navážka, u pevných spektrometrických minimální plocha atp. RM může být například dokonale homogenní pro emisní spektrometrii a zároveň zcela nevyhovující pro lokální mikroanalýzu. Důležité je rozlišovat nehomogenitu mezi vzorky a uvnitř vzorku. Obě jsou důsledkem technologické historie RM a ovlivní jejich spolehlivost jako kalibračního prostředku. Nehomogenita mezi vzorky jedné šarže znamená, že existuje rozdíl mezi skutečným obsahem vzorku, který byl odebrán pro stanovení atestované hodnoty, a mezi jednotlivými distribuovanými vzorky. Tato nehomogenita ovlivňuje správnost kalibrace. Přesnost kalibrace je pak závislá na nehomogenitě uvnitř vzorku. Má-li být kalibrace přesnější než provozní analýzy na ní založené, pak musí pochopitelně i RM být homogennější než provozní vzorek. Je zřejmé, že právě dodržení homogenity tvoří základní problém technologické části výroby RM.

Již tyto základní úvahy naznačují, že úkol výroby RM není lehký. Vždyť RM jsou určeny i pro analýzu materiálů vyrobených nejlepší známou technologií a pro kalibraci nejpřesnějších známých metod. Výrobce RM by tedy měl vyhovět paradoxnímu požadavku - aby použil lepší techniky než ty, co jsou známe. Často se pak při konkrétním řešení naskytne potíže, o jakých se vzácnou upřímností hovořil na symposiu o RM v Los Angeles v roce 1972 pan W.R. Kennedy z American Cast Iron Pipe Co. O zkušenostech s aplikací v NBS vyvinuté technologie pro spektrometrické RM litiny vypráví: pro lití byl vyčleněn zvláštní tým a přizván poradce NBS. Vše bylo pečlivě propočteno, připraveno a ověřeno - přesto první tavba byla komedie plná omylů. Nejen že popraskala jádra i keramické zátky, ale byla i nevhodná teplota a nevyšlo ani složení, ani časový plán - zkrátka ne-

vyšlo vůbec nic. Tehdy jsme ještě netušili, že bude třeba ještě celý rok pokusů a neúspěchů, než jsme nakonec z jedenácti taveb mohli ztěžší vybrat 6 vyhovujících. To je tedy problém RM z pohledu výrobce; jak se celková situace jeví uživateli? Všimněme si nejprve situace na světovém trhu. Podle neúplných podkladů je dnes asi 5 000 různých RM a ročně se distribuuje asi půl milionu vzorků. Od roku 1910, kdy už je možno o produkci RM mluvit, se sortiment i celková spotřeba s pozoruhodnou pravidelností každých 10 let zdvojnásobuje. Rozsah materiálů se rozšiřuje. Od prvních RM ocelí až po současné RM živočišných a rostlinných tkání, enzymů, polymerů apod. Roste i přesnost i počet zaručovaných složek - srovnajme třeba ocele NBS z roku 1906 se zaručeným C a S a dnešní ocele téhož ústavu s téměř 40 zaručovanými prvky.

Protože už není v technických a kapacitních možnostech národních organizací pokrýt celý požadovaný sortiment, staly se RM předmětem čilého mezinárodního obchodu. Tak např. RM NBS Washington se používají v celém světě, RM britského BAS se užívají ve více než 50 zemích, RM VÚ ČKD se dnes vyváží do 31 zemí. Československo dováží prostřednictvím PZO Metalimex ročně RM asi za 400 000 dev Kčs, vývoz je asi o 100 000 Kčs vyšší. Složitě a náročně projekty se řeší v mezinárodním měřítku, zejména v rámci RVHP a EHS. V rámci RVHP byla nově založena vědecko výrobní organizace Interetalonpribor, která vedle speciálních měřicích přístrojů má také organizovat společnou výrobu RM. Značnou část spotřeby kryjí RM podnikové, které se užívají s neoficiálním souhlasem národních organizací. U spektrometrických RM hliníkových slitin kryjí podnikové RM více než 3/4 spotřeby.

Přesto všechno se rozdíl mezi poptávkou a nabídkou dále prohlubuje. Vede to někdy až ke groteskním situacím, kdy např. některé RM NBS jsou už vyhrazeny pouze americkým spotřebitelům; někteří američtí podnikatelé pak využijí registrace své firmy k nákupu RM, které pak v Itálii nebo Francii prodají za podstatně zvýšenou cenu.

Obraťme nyní pozornost k historii a současné situaci RM v Československu. Tak jako v jiných zemích, začínalo

se třískovými RM kovů, které se pro vnitřní potřebu laborato-
ří velkých hutních závodů připravovaly už před válkou. Přípra-
va spektrometrických RM byla zákonitě úzce spjata s činností
naší jubilující společnosti. Vždyť bylo-li hlavním cílem teh-
dejšího Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze zapojit
spektrografické, spektroskopické a později perspektivní spek-
trometrické metody plně a účinně do služeb národního hospodář-
ství, představoval řešení výzkumu a výroby RM jeden z prvních
a základních kroků. Na místě, kde shodou okolností právě v těch-
to dnech lijeme poslední tavby nové serie RM siluminů, odlil
Dr.Kuba první československé spektrometrické RM - shodou okol-
ností rovněž silumin. Pak už následovala dlouhá řada dalších,
jež ani nelze v krátkém referátu všechny vyjmenovat. Mezi prv-
ními byly Výzkumné ústavy Škoda Plzeň a ČKD, Kovohutě, Rokycan-
y, VÚK Panenské Břežany, pak následovaly velké závody ostrav-
ské oblasti a další a další. Činnost jednotlivých pracovišť
se rozrůstala od RM kovů - čisté Fe, nízkolegované oceli, čis-
tá a hutní měď, slitiny hliníku s křemíkem a zinkem, nikl;
přes feroslitiny, Fe aglomeráty, rudy, strusky až po geologic-
ké suroviny.

Na výrobu RM kovů pro plynulé zásobení kvantomet-
rů se plně zaměřil VÚ ČKD. Od roku 1964 byly připraveny dvě
sady ocelí, dvě sady litin, po jedné sadě siluminů, hydrónalů,
cínových a hliníkových bronzí a mosazí.

Současně s touto aktivitou jednotlivých pracovišť
se rozvíjela v ČSSR i výroba RM atestovaných jako Českosloven-
ský analytický normál. Dnes jsou k dispozici 2 surová železa
a 2 uhlíkové oceli VŽKG, 14 legovaných ocelí SONP, 15 hliníko-
vých slitin VÚK, 9 feroslitin Oravských ferozliatinárských zá-
vodů v Istebném, 2 šedé litiny SVÚM Brno, 6 strusek a 6 šamo-
tů NHKG, 4 magnesity, 6 dinasů, magnesit, kaolin a sklářský pí-
sek ÚNS, 13 rud ÚVRu. Tyto RM jsou zaměřeny především na roz-
tokovou analýzu, i když nekovové z nich už byly úspěšně apli-
kovány i v RFA spektrometrii.

Československo se rovněž účastní mezinárodní spo-
lupráce, čs.delegace v RVHP patří k nejaktivnějším a iniciativ-
ně se podílí na řadě úkolů včetně výroby společných RM v rámci

komise geologické, program pro kovy je v přípravě.

Sortiment československých RM je tedy poměrně širo-
ký a i jejich kvalita odpovídá tradicím a úrovni naší analytiky.

Znamená to snad, že můžeme být spokojeni? Stačí
se letmo seznámit se současnou organizací a perspektivami a po-
cit uspokojení mizí.

V jiných vyspělých zemích řeší RM samostatný kom-
plexně vybavený ústav nebo pracoviště (VNIISO Sverdlovsk v SSSR,
NBS Washington v USA, BAS Middlesbrough, DAMW - NDR). V jiných
státech vyvíjí RM příslušné resortní ústavy na základě průzkumu
potřeby a perspektivních plánů - Japonsko, MLR a řada dalších.
U nás ústřední pracoviště neexistuje a řada resortních ústavů
se od RM distancuje. Hlavní břemeno prací leží na výzkumných
pracovištích jednotlivých závodů. Právně technickou agendu řídí
ÚNM s poradními komisemi, zejména komisí pro čs.analytický nor-
mál a dále normalizačními komisemi pro rozbory jednotlivých ma-
teriálů. ÚNM na doporučení těchto komisí může přípravou RM po-
věřit pracoviště, které se z nějakých důvodů, většinou urgentní
potřeby vlastního závodu, rozhodne podstoupit nemalé technické
i ekonomické riziko takové akce. Může tedy schvalovat přihlášky
dobrovolníků, nikoli určovat pořadí důležitosti a termíny pří-
pravy nových RM. Nejsou však ani podklady pro takové řízení -
v ČSSR nebyl nikdy proveden komplexní průzkum současné a per-
spektivní potřeby RM, tím méně jeho hodnocení a koncepce a jed-
notný plán.

Důsledky této živelnosti jsou dnes dosti tíživé.
Před asi deseti lety byly koncipovány čs. RM uhlíkových a le-
govaných ocelí a hliníkových slitin. Již tehdy hrála spektro-
metrie důležitou, ne-li rozhodující úlohu v provozní metalurgic-
ké analytice, a z investičních plánů závodů bylo jasné, že úpl-
ně převládne. Přesto byly tyto RM technických kovů koncipovány
pouze jako třískové, a dnes se kvantometrické RM technických
kovů musí dovážet, nebo používat podnikové. Čs. RM těchto kovů
v třískové formě zato budou ještě dlouhá léta vyplňovat regály
skladišť.

Každá kritika má svůj pozitivní smysl jen tehdy,
je-li konstruktivní. Proto naše spektroskopická společnost

ustavila komisi, jejímž hlavním úkolem je pomoci nepříznivé aspekty RM u nás řešit.

Komise pro RM a normalizaci začne pracovat od ledna příštího roku. Její činnost v oboru RM bude setávat za prvé ze získávání a šíření informací, za druhé z organizování spolupráce mezi členy společnosti příp. dalšími odborníky, v tlumočení požadavků a návrhů společnosti ústředním orgánům.

V oblasti informací bude komise shromažďovat informace o sortimentu, složení, cenách a dalších parametrech světových RM a formou úplných a tříděných souborů vydávat. První takový soubor byl vydán ještě před oficiálním zahájením činnosti. Je to přehled RM základních technických kovů, který vydal Dům techniky v Budějovicích. Dále hodlá komise zorganizovat průzkum současné a perspektivní potřeby RM u nás, seznámit s ním odbornou veřejnost a předat ústředním orgánům.

V oblasti spolupráce budou organizovány schůzky odborníků s výměnou zkušeností s používáním i přípravou RM. První schůzka je předběžně plánována na duben 1975.

Obdobné úkoly bude komise řešit a koordinovat v oblasti normalizace. Faktická úloha spektrometrických metod v našem hospodářství je dnes mnohonásobně vyšší než jejich zakotvení v technicko-právních podkladech ČSN. Prostřednictvím komise se tedy odborná kapacita naší společnosti plně účastní tvorby norem. Nejurgentnější a nejdůležitější úkol se však týká včasného a důsledného zavádění nové soustavy zákonných měrových jednotek SI. Komisí pro RM a normalizaci vytvořila tedy Čs. spektroskopická společnost nástroj pro koordinaci a tlumočení našich názorů, zájmů a snah. Záleží teď na nás všech, jak účinně bude tento nástroj využíván ku prospěchu celého národního hospodářství.

A. S c h ü t z , SNTL, Praha : Závažná opatření pro přechod na Mezinárodní soustavu jednotek SI v celostátním měřítku.⁺)

Dne 2. května 1974 byla schválena nová státní norma ČSN 01 1300 "Zákonné měrové jednotky", která od 1. srpna tohoto roku nahrazuje stejně označenou státní normu, jež v návaznosti na zákon č. 35/62 Sb. vstoupila v platnost před jedenácti lety.

Každá změna normy, která doporučuje, připouští, avšak také nedoporučuje, resp. přímo zakazuje některé jednotky, v nichž se udávají hodnoty různých veličin, znamená pro ty, kdo pracují a zejména publikují v přírodních a technických vědách, obdobný zákrok, jakým je změna pravopisných pravidel pro celou písíci veřejnost. Proto je také obecná reakce na vyhlášení změn v používaných jednotkách velmi podobná tomu, co následuje po vydání zásadněji pozmeněných Pravidel českého pravopisu. Až na poměrně malý okruh osob, které se při dokonalé znalosti historických, teoretických i praktických důvodů mluvících pro uskutečnění příslušných změn delší dobu aktivně podílely na všech potřebných přípravách a opatřeních k jejich uvedení do života, dochází u naprosté většiny zainteresovaných (či spíše "postižených") osob k určitému vyvedení z rovnováhy, jež se podle povahy jednotlivce projeví celou škálou postojů, od zarytého odporu až po tichou rezignující skříčenost. Neboť dále než k odevzdanému smíření se s nepříjemnostmi a obtížemi, jež nevyhnutelně provázejí celé období přivykání novým zásadám, se v prvním okamžiku zřejmě nedostane ani ten, kdo plně uznává naléhavost a účelnost vyhlášených změn a kdo je dokonce i ochoten podle svých možností přispět k tomu, aby se co nejrychleji všeobecně vžily. Tyto celkem pochopitelné pocity nelibosti, s nimiž je třeba počítat v souvislosti s vyhlášením nové normy ČSN 01 1300, by vlastně teoreticky měly být méně výrazné než ty, které provázely vyhlášení původní normy v roce 1963. Tehdy totiž šlo o zavedení sku-

⁺) Upravená verze článku publikovaného v časopisu Chemický průmysl, č. 8 ročníku 1974 v příloze Chemie a lidé.

tečně nové soustavy měrových jednotek, jejíž mnohé jednotky byly do té doby celkem neznámými pojmy, kdežto nyní jde pouze o důslednější používání již nikoliv zcela neznámých jednotek SI, a tím ovšem tako o opuštění některých dosud tolerovaných jednotek vedlejších. Ovšem okolnosti, za kterých je vyhlášována nová norma, nepřipouštějí pochyb, že okruh "postižených" bude tentokrát podstatně větší neboť o skutečnou závaznost této normy bude postaráno i řadou zcela konkrétních, celostátně platných opatření. Jde totiž o to, aby Mezinárodní soustava jednotek SI (Système International d'Unités), která se od prvních návrhů z konce čtyřicátých a začátku padesátých let vyvinula přes svou první podobu z roku 1960 do konečné formy schválené 14. generální konferencí vah a měř v roce 1971, byla nejpozději do roku 1980 důsledně používána ve všech oblastech národního hospodářství, vědy, kultury, školství a ve všech ostatních odvětvích a oborech, a to nejen v ČSSR, ale i ve všech ostatních státech RVHP. Tento záměr vyjádřený doporučením RS 3472-72 "Postup a způsoby přechodu na Mezinárodní soustavu jednotek (SI) - Obecná doporučení", přijatým v roce 1972 Stálou komisí pro normalizaci RVHP, je pro území ČSSR konkretizován a organizačně zajištěn usnesením Federální vlády ČSSR č. 7 z ledna 1974, v jehož příloze jsou mimo jiné stanoveny termíny pro ukončení jednotlivých důležitých etap přechodu na nové zákonné jednotky.

Z hlediska odborné publikační činnosti je přitom důležité, že již v tomto roce se má při přípravě nových státních, oborových a podnikových norem, příspěvků do odborných a vědeckých časopisů a při autorském i redakčním zpracování vědeckých a technických knižních publikací postupovat tak, aby veškerá periodická i neperiodická odborná a vědecká literatura vycházející po 1.1.1975 uváděla veškeré údaje přednostně v nových zákonných jednotkách. (Údaje ve starých, novou normou nepřipouštěných jednotkách bude sice možno až do 1.1.1980 rovněž připojovat, avšak vždy jen v závorce nebo v poznámce.) Současně se od roku 1975 započne se systematickou revizí všech dosud vydaných státních, oborových a podnikových norem, právních předpisů a učebnic i skript pro všechny druhy škol, aby nejpozději do roku 1979 bylo možno připravit nová vydání upravená v duchu

nové normy. Všechna opatření na úseku dokumentace, odborného tisku, výchovy i propagace v hromadných sdělovacích prostředcích budou pochopitelně provázena odpovídajícími opatřeními v oblasti průmyslu i obchodu, kde půjde především o včasné zajištění výroby nebo dovozu měřidel se stupnicemi v nových jednotkách a o postupné, maximálně hospodárně nahrazování dosud používaných měřidel (anebo alespoň jejich stupnic), popř. o dodání vhodných přepočítávacích tabulek k měřidlům dosavadním.

Nová norma ČSN 01 1300 přináší tyto hlavní změny: Napříště bude dovoleno používat jako zákonných jednotek pouze jednotek Mezinárodní soustavy SI, a to

- a) jednotek základních, což jsou metr (m), kilogram (kg), sekunda (s), ampér (A), kelvin (K), kandela (cd), mol (mol);
- b) jednotek doplňkových, což jsou radián (rad) a steradián (sr);
- c) jednotek odvozených (dříve hlavních), jež jsou pro každou veličinu odvozeny koherentně (tj. bez použití násobících koeficientů různých od jedničky) z jednotek základních.

Kromě toho lze používat dekadicky tvořených násobků a dílů jednotek SI, jejichž názvy se tvoří z názvů jednotek SI pomocí předpon:

tera - T (10^{12}), giga - G (10^9), mega - M (10^6), kilo - k (10^3), hekto - h (10^2), deka - da (10^1), deci - d (10^{-1}), centi - c (10^{-2}), mili - m (10^{-3}), mikro - μ (10^{-6}), nano - n (10^{-9}), piko - p (10^{-12}), femto - f (10^{-15}), atto - a (10^{-18}).

Dále je dovoleno trvale používat vybraných, jmenovitě uvedených vedlejších jednotek (nepatřících k soustavě SI) a rovněž jejich dekadicky tvořených násobků a dílů, stejně jako jednotek vytvořených z těchto jednotek (resp. z jejich násobků a dílů) a ostatních zákonných jednotek. Jsou to tyto jednotky:

minuta - min (= 60 s),

hodina - h (= 3600 s),

den - d (= 86 400 s),

stupeň (rovinného úhlu) - ($^{\circ}$) ($1^{\circ} = \frac{\pi}{180}$ rad),

minuta (rovinného úhlu) - ($'$) ($1' = \frac{\pi}{10\ 800}$ rad),
 vteřina (rovinného úhlu) - ($''$) ($1'' = \frac{\pi}{648\ 000}$ rad),
 litr - ℓ ($= 10^{-3}$ m³ (přesně)),
 tuna - t ($= 10^3$ kg),
 Celsiův stupeň - $^{\circ}\text{C}$
 elektronvolt - eV $= (1,602\ 10 \pm 0,000\ 07) \cdot 10^{-19}$ J/
 unifikovaná atomová hmotnostní jednotka - u ($= 1,660\ 53 \cdot 10^{-27}$ kg)
 astronomická jednotka - AU ($= 149\ 600 \cdot 10^6$ m),
 parsec - pc ($= 30\ 857 \cdot 10^{12}$ m).

Je možné, že po projednání v orgánech RVHP bude alespoň dočasně povolena také jednotka hektar - ha ($= 10^4$ m²); v žádném případě se s ní však nepočítá pro použití v technických normách. Poněkud nejasná je zatím situace jednotky bar ($= 10^5$ Pa). Podle doporučení generální konference vah a měr by povolena být neměla, avšak mezinárodní dokument ISO 1000 ji uvádí mezi jednotkami povolenými. V ČSN 01 1300 je zatím bar zařazen mezi jednotkami, které mají do roku 1980 vymizet.

Z toho, co bylo uvedeno, vyplývá, že napříště bude třeba se v publikacích vyvarovat řady dosud používaných jednotek, z nichž nejtypičtější uvádíme v následujícím přehledu (v závorce jsou uvedeny jednotky náhradní a pořp. též přepočítávací vztah) :

\AA (m, díly ; $1 \text{\AA} = 10^{-10}$ m)
 a (m², násobky; $1 a = 10^2$ m²)
 dyn (N, díly; $1 \text{ dyn} = 10^{-5}$ N)
 dyn/cm (N/m, díly; $1 \text{ dyn/cm} = 10^{-3}$ N/m)
 erg (J, díly; $1 \text{ erg} = 10^{-7}$ J)
 barn (m²; $1 \text{ barn} = 10^{-28}$ m²)
 p, kp, Mp (N, násobky a díly; $1 \text{ kp} = 9,806\ 65$ N (přesně))
 kp/m³, kp/dm³ (N/m³, N/dm³)
 kp/mm², kp/cm², kp/m², at, Torr, bar (Pa, násobky a díly;
 $1 \text{ kp/cm}^2 = 1 \text{ at} = 98,0665 \text{ kPa}$; $1 \text{ Torr} = 133,322 \text{ Pa}$;
 $1 \text{ bar} = 100 \text{ kPa}$)
 kp m, Mp m (J, N m, násobky a díly)
 kp m/cm⁻² (J/cm², násobky a díly)
 P, cP (Pa s; $1 \text{ P} = 0,1 \text{ Pa s}$)

St, cSt (m²/s; $1 \text{ St} = 10^{-4}$ m²/s)
 kcal, cal (J, násobky a díly; $1 \text{ kcal} = 4\ 186,8 \text{ J}$ (přesně))
 k (W, násobky; $1 \text{ k} = 735,499 \text{ W}$)
 kh (J, násobky)
 kp m/s, kcal/h, kcal/s (W, násobky a díly)
 kcal/h m K (W/m K, násobky a díly)
 kcal/kg K (J/kg K, násobky a díly)
 G (T a díly; 1 G odpovídá 10^{-4} T)
 Mx (Wb a díly; 1 Mx odpovídá 10^{-8} Wb)
 Oe (A/m; 1 Oe odpovídá $\frac{1000}{4\pi}$ A/m)
 Ci (s⁻¹; $1 \text{ Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$)
 rad (dávka záření) (J/kg; $1 \text{ rad} = 10^{-2}$ J/kg)
 R (C/kg; $1 \text{ R} = 2,58 \cdot 10^{-4}$ C/kg)

K jakým náhradním jednotkám (tj. k jakým dílům či násobkům jednotek SI) se v jednotlivých případech uchýlíme, to ukáže praxe. Bude přitom třeba respektovat požadavek, aby číselné hodnoty veličin vycházely pokud možno v rozmezí od 0,1 do 999. V přechodném období, kdy bude velké množství údajů získáváno přepočtem z údajů ve starých jednotkách, bude situace navíc komplikována tím, že přepočtený údaj má být uváděn jen na takový počet platných míst, kolik jich měl údaj, z něhož bylo přepočítáváno (povede to k přednostní volbě větších jednotek, při jejichž použití budou platná místa číselné hodnoty končit už buď těsně před desetinnou čárkou, anebo až za ní).

Je velmi pravděpodobné, že budeme v nové normě rovněž hledat jednoznačnou odpověď na řadu otázek, které při jejím praktickém uplatňování vyvstanou. Nemělo by to však být ze strany autorů chápáno jako dobrý argument pro tvrdošíjně obhajování dosavadní praxe, neboť jde o zcela přirozený rys normativního dokumentu, který sice musí postihnout všechny hlavní zásady, avšak nemůže přitom pamatovat na všechny speciální případy. Bude zřejmě velice záležet na autorech a redakcích, aby cestou klidné a trpělivé spolupráce a za eventuálního přispění Úřadu pro normalizaci a měření našli vhodné řešení i pro zdánlivě neřešitelné problémy, které se v této oblasti v souvislosti s novou normou vyskytnou.



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 31.ledna 1975

Pouze pro vnitřní potřebu.