



Československá spektroskopická společnost
ČESKOSLOVENSKÁ SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST
PRAHA 6, KOZLOVSKÁ 1

Bulletin

Čs. spektroskopická společnost

231
př. ČSAV

160 00 PRAHA 6, Kozlovská 1

49

1986

Bulletin
Čs. spektroskopické společnosti

Číslo 49

říjen 1986

Z obsahu 49.čísla Bulletinu :

	str.
Zprávy ze Společnosti	2
Udělení plakety Jana Marca Marci	3
Ke stému výročí narození prof. Quadráta	5
K úmrtí prof. Čůty	6
Rámcový plán odborných akcí na rok 1987	7
Výsledky soutěže mladých spektroskopiků 1985	10
Akční program ČSSS na 8.pětiletku	13
Sekce optické atomové spektroskopie :	
OS spektroskopie nevodivých materiálů (VIII.seminář)	19
OS automatické spektrometrie v hutnictví (Symposium Hilger Analytical)	20
OS atomové absorpční a plamenové spektroskopie (10.seminář/Černá v Pošumaví, červen 1986)	20
Sekce molekulové spektroskopie :	
OS vibrační spektroskopie (Kurz měření vibračních spekter/Praha, leden 1986)	21
OS magnetické rezonanční spektroskopie (15.seminář/Brno, únor 1986)	25
OS spektroskopie pevného stavu (29.schůze; seminář "Využití synchrotronového záření"/Alšovice, červen 1986)	33
Sekce speciálních spektroskopických metod :	
OS instrumentálních radioanalytických metod (IAA 86)	44
OS hmotnostní spektrometrie (PETROMASS'86)	45
OS Mössbauerovy spektroskopie (Mezinárodní seminář/Valtice, květen 1986)	45
OS rentgenové spektrometrie (seminář/Donovaly, červen 1986)	47
Oznámení	49
Nabídka	50

Zprávy ze Společnosti

Od počátku roku 1986 do uzávěrky tohoto čísla (září 86) se sešlo předsednictvo hlavního výboru ČSSS celkem jedenáctkrát k projednání agendy Společnosti. Byla projednávána příprava 8.čs.spektroskopické konference v Českých Budějovicích v r. 1988 a pro účastníky bylo předběžně zajištěno ubytování v hotelu Gomel (v týdnu od 19.6.1988). Současně byla zahájena příprava 5.čs.konference o atomové absorpční spektrometrii, která se uskuteční 5. - 9.10.1987 v Chlumu u Třeboně. Bylo rozhodnuto, že kurz atomové absorpční spektrometrie se uskuteční v roce 1987. Předsednictvo zajistilo pravidelné dodávání informací pro časopis ESN (European Spectroscopy News). Byl diskutován návrh kandidátky členů hlavního výboru Společnosti pro volby na období 1987-9 a možnosti dosažení vyrovnané úrovně práce všech odborných skupin a komisí. Do plánu činnosti Společnosti bylo zařazeno pořádání 4.mezinárodního symposia o fyzice povrchů v roce 1987. Čs.spektroskopická společnost byla pověřena uspořádáním konference EUCMOS v roce 1989. Předsednictvo vyhovělo opožděnému pozvání pořadatelů rozšířeného zasedání Komise pro spektroskopii zemí RVHP konaného v září 1986 v MLR, aby se za Československo zúčastnila ČSSS prostřednictvím delegátů z hlavních sekcí Společnosti. Byl projednán a schválen akční program Společnosti na osmou pětiletku.

Dne 30.června 1986 se konala v Národním technickém muzeu 41.schůze hlavního výboru ČSSS, na jejímž programu bylo předání cen vítězům soutěže mladých spektroskopiků za rok 1985, zprávy o činnosti předsednictva, sekcí a komisí. Dále byl předložen návrh plánu odborné činnosti na rok 1987, plán zahraniční spolupráce a návrh rozpočtu na r. 1987.

Zprávu o činnosti předsednictva přednesl Ing.Trška. Dr.Sychra přednesl zprávu o odborné činnosti a v závěru upozornil, že schůze odborných skupin musí být před pořádáním oznámeny sekretariátu Společnosti a po schůzi musí být zasláno hlášení o počtu účastníků, stručná charakteristika jednání a resumé přednesených referátů.

Ing.Kuboň podal návrh k zlepšení koordinace akcí odborných skupin. Hlavní výbor schválil plán odborných akcí na rok 1987 (je uveden dále na str. 7).

Doc.Ksandr oznámil, že byla uzavřena smlouva o spolupráci s Chemickou společností NDR a že se uvažuje o uzavření smlouvy se Slovinskou chemickou společností a s partnerskou organizací v MLR. Dr.Sychra doplnil, že prof.Petrakiev (BLR) připravuje návrh smlouvy o spolupráci bulharské strany s ČSSS.

Doc.Ksandr důrazně upozornil, že zprávy do časopisu ESN (European Spectroscopy News) o akcích pořádaných Čs.spektroskopickou společností je nutno posílat přes sekretariát.

Hlavní výbor rozhodl udělit plaketu Jana Marca Marci RNDr. Janu Mrázovi, předsedovi Čs.spektroskopické společnosti, u příležitosti jeho nadcházejícího životního jubilea.

Udělení plakety Jana Marca Marci RNDr. Janu Mrázovi

Zdá se, že téměř desetiletá tradice plakety Jana Marca Marci, udělená Čs.spektroskopickou společností předním odborníkům ve spektroskopii za významný přínos jejímu rozvoji, nabyta ve světě znamenité vážnosti, neboť je v poslední době často připomínána v řadě odborných časopisů. Každoročnímu projednávání návrhů v hlavním výboru Společnosti předchází zpravidla široká diskuse, neboť platí přísná omezení v počtu kandidátů. Nicméně k poslednímu návrhu, aby plaketa Jana Marca Marci byla udělena RNDr.Janu Mrázovi, nebylo připomínek nebo protinávrhů, což je ve společenství spektroskopických disciplín, z nichž každá stojí za svým kandidátem, jev vzácně ojedinělý. A nutno připomenout, že okolnost kandidátovy současné funkce předsedy ČSSS tu rozhodně nebyla faktorem situaci ovlivňujícím. Zasluzí kandidáta v oblasti atomové spektroskopie jsou dostatečně známy v odborných kruzích, nicméně k sjednocení hlasů přispěly respektované schopnosti kandidáta v oblasti organizace a řízení spektroskopického výzkumu, čímž nebývá často nadán každý uznávaný odborník. A tak padesáté narozeniny RNDr. Jana Mráze byly podnětem k ocenění jeho vědecké práce i organizační činnosti udělením plakety Jana Marca Marci. Žel, datum narozenin jubilanta, spadající právě doprostřed prázdninových měsíců, nedávalo příležitost předat plaketu důstojnější formou, než prostřednictvím delegace předsednictva hlavního výboru. Ta zastihla jubilanta v kruhu gratulantů krátce poté, co převzal státní vyznamenání Za vynikající práci. K tomuto významnému společenskému oceňování práce RNDr. Jana Mráze blahopřeje redakce Bulletinu jisté i se všemi čtenáři.

Výňatek ze zdůvodnění návrhu na udělení plakety Jana Marca Marci RNDr. Janu M r á z o v i , který připravil Ing. Karel Bičovský.

Odborná činnost RNDr. Jana Mráze je zaměřena na oblast optické emisní spektroskopie kovů.

V roce 1958 nastoupil do Výzkumného ústavu ČKD Praha. Významně se podílel na průkopnické aktivitě spektroskopické laboratoře při zavádění automatické spektrometrie do provozní praxe hutních a strojírenských závodů v ČSSR.

Zpočátku pracoval jako vývojový technik, od roku 1961 jako vedoucí. Absolvoval na přírodovědecké fakultě University Karlovy obor analytické chemie.

Celá dosavadní činnost RNDr. Jana Mráze byla důsledně podřízena hlavnímu cíli - bezprostřednímu a efektivnímu zavádění vědy a výzkumu do výroby a společenské praxe. Tento cíl realizoval ve dvou směrech : jako výzkumný a vedoucí pracovník v oboru a jako dlouholetý významný funkcionář Čs. spektroskopické společnosti při ČSAV.

Ve své výzkumné práci se zaměřil na optimalizaci spektrochemického procesu a vyhodnocení spektrochemického signálu. Výsledky prezentoval v řadě přednášek, publikací, monografií a skript a uplatnil je v několika vynálezech. Přispěl k objasnění a eliminaci strukturních a matričních vlivů při kvantometrické analýze litiny a umožnil tak její plné provozní uplatnění.

Činnost RNDr. Jana Mráze byla oceněna řadou významných podnikových a ministerských vyznamenání; m.j. Nejlepší pracovník FMHTS v roce 1980. V roce 1986 mu bylo uděleno státní vyznamenání Za vynikající práci.

Od počátku své odborné aktivity se zapojil do práce Čs. spektroskopické společnosti při ČSAV - od vedoucího odborné skupiny spektroskopie kovů přes vedoucího atomové sekce po současnou funkci předsedy.

Rozhodujícím způsobem přispěl k organizaci a zdárnému průběhu významných domácích a zejména mezinárodních setkání, jako CSI 1977 a CANAS v roce 1984. Tyto akce důstojně prezentovaly úroveň československé spektroskopie ve světovém měřítku.

Ke stému výročí narození

Prof. Ing. Dr., Dr.h.c. Otakara Q u a d r á t a , DrSc

Ing.M.Vobecký, CSc, ČSAV ÚNBR, Praha

V roce 1986 vzpomínáme stého výročí narození zakládajícího člena a prvního předsedy Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze profesora Otakara Quadráta. Téměř čtyři desítky let nás dělí od vzniku Sdružení, které kromě významného podílu na poválečném rozvoji spektroskopických metod vytvořilo i organizační základ pro vybudování vědecké společnosti reprezentující československou spektroskopii. Na ustavující schůzi Sdružení konané dne 15.prosince 1949 byl zvolen předsedou prof.Otakar Quadrát, tajemníkem Ing.František Plzák. Pro počáteční činnost Sdružení poskytl prof.Quadrát záštitu v rámci tehdejšího Ústavu chemické metalurgie a metalografie Vysoké školy chemicko-technologického inženýrství ČVUT. Ve funkci předsedy Sdružení působil do roku 1960.

Prof.Quadrát se narodil 2.zářím 1886 v Praze, kde studoval chemii na technice. V letech 1908 až 1920 působil v ocelárnách v Praze Vysočanech (dnešní ČKD) a v Hrádku u Rokycan, kde m.j. rozvíjel analytickou kontrolu se zaměřením na odstranění empirických přístupů ve výrobě oceli. V roce 1920 se habilitoval na Vysoké škole chemicko-technologického inženýrství v Praze pro obor metalurgie železa. Po jmenování profesorem chemické metalurgie a metalografie v roce 1923 přednášel metalurgii po prof. Františku Waldovi (1861 - 1930). Posléze byl pověřen i přednáškami obecné experimentální chemie anorganické. Již od počátku působení v průmyslu chápal analytické metody jako nezbytný nástroj k získání informací o složení i vlastnostech materiálů zpracovávaných hutnickými pochody. Jeho úsilí o uplatňování exaktních přístupů v hutnické technologii úzce souviselo s aktivním zájmem o analytické metody, mezi něž patřila i spektrografie. Od roku 1947 byl též členem francouzského spektrografického sdružení. Z jeho badatelské činnosti připomeňme kromě příspěvků k hutnické analýze alespoň některé práce jako studium strusek se zřetelem na zvládnutí reakcí probíhajících v procesu Siemens-Martinové, studium vlastností a grafitisace temperované litiny, studium slitin olova a antimonu a hliníku s mědí a niklem, reakcí mezi kysličníky a sulfidy kovů za metalurgických podmínek.

Významný je i jeho přínos v oblasti pedagogické. Po návratu z nacistického vězení v roce 1945 se ujal obnovy ústavu, podílel se aktivně na organizaci studia, byl zvolen děkanem a v roce 1946 rektorem Českého vysokého učení technického.

O uznání jeho vědeckých zásluh svědčí např. udělení čestného doktorátu universitou v Nancy a členství v Královské české společnosti nauk.

Valné shromáždění Československé spektroskopické společnosti při ČSAV ocenilo v roce 1970 jeho zásluhy o založení a vytvoření podmínek pro další rozvoj naší spektroskopické organizace udělením čestného členství in memoriam.

S upřímným zármutkem přijala československá odborná veřejnost zprávu, že dne 15. března 1986 zemřel ve věku 88 let

prof. Ing. Dr. František Č ů t a , DrSc
člen korespondent ČSAV,
čestný předseda Čs. společnosti chemické,

nositel Řádu práce, zlaté čestné plakety ČSAV za zásluhy o vědu a lidstvo, zlaté čestné plakety J. Heyrovského za zásluhy v chemických vědách, Hanušovy medaile, čestné medaile Federace evropských chemických společností, čestný člen Slovenské chemické společnosti a Polské chemické společnosti. Mnoho let působil jako funkcionář Čs. společnosti chemické i ve funkci jejího předsedy, byl předsedou redakční rady časopisu Chemické listy.

V době své aktivní činnosti byl řádným profesorem a vedoucím katedry analytické chemie VŠCHT v Praze, byl mezinárodně uznávaným odborníkem v oboru speciálních analytických metod.

Prof. František Čůta byl čestným členem Československé spektroskopické společnosti a v roce 1978 mu byla udělena plaketa Jana Marca Marci.

Rámcový plán odborných akcí na rok 1987

Sekce optické atomové spektroskopie

Pracovní seminář o ICP
(III. čtvrtletí, 4 dny, místo neurčeno)

OS atomové absorpční a plamenové spektroskopie

- Kurz atomové absorpční spektroskopie
(leden, 5 dnů, Praha)
5. čs. konference AAS se zahraniční účastí
(říjen, 5 dnů, Chlum u Třeboně)

OS spektroskopie nevodivých materiálů

Pracovní schůze na téma "Súčasná problémy v oblasti spektrochemické analýzy s buzením v elektrickom oblúku"
(II. čtvrtletí, 2 dny, Bratislava)

OS automatické spektrometrie v hutnictví

- Pracovní schůze na téma "Tavící metody v oblasti automatické emisní optické a rtg fluorescenční analýzy"
(duben, 1 den, Ostrava)
- Seminář o nových směrech v automatizovaných systémech analytické kontroly v hutích
(říjen, 1 den, Ostrava)

Sekce molekulové spektroskopie

OS vibrační spektroskopie

- Schůze na téma "Zkušenosti s novými typy IČ spektrometrů (Specord M80, systémy s data stanicemi); spojení s jinými metodami, např. IR-GC
(II. čtvrtletí, 1 den, Praha)
- Schůze na téma "Vibrační spektroskopie a problémy ochrany životního prostředí"
(III. čtvrtletí, 1 den, Praha)
- Kurz měření vibračních spekter
(únor, 5 dnů, Praha)

OS magnetické rezonanční spektroskopie

32. pracovní schůze : XIV. EPR seminář
(květen, 3 dny, Pezinská Baba)
33. pracovní schůze : XVII. NMR seminář
(červen, 5 dnů, Valtice)

OS elektronové spektroskopie a fotochemie

- Schůze na téma "Časově rozlišená luminiscence"
(květen, 1 den, Praha)
- Schůze na téma "Luminiscenční vlastnosti organických luminoforů"
(říjen, 1 den, Pardubice)

OS spektroskopie pevného stavu

- a) Přednáška "Příchod femtosekundové spektroskopie polovodičů" (březen, 1 den, Praha)
- b) Seminář "Spektroskopický experiment řízený počítačem" (květen, 1 den, Praha)
- c) přednáška zahraničního hosta FzÚ ČSAV
- d) účast na konferenci 12th Int. Conf. on Amorphous and Liquid Semiconductors (srpen, Praha)

OS rotační a rotačně-vibrační spektroskopie

- a) V každém čtvrtletí seminář s referáty o problematice řešené na různých pracovištích v ČSSR
- b) Přednáška zahraničního hosta "Nové směry vibračně-rotační teorie spekter radikálů a iontů" (II.čtvrtletí, 1 den, Praha)
- c) Přednáška zahraničního hosta "Spektroskopie mezi hvězdami a její význam pro moderní astrofyziku" (III.čtvrtletí, 1 den, Praha)

Sekce speciálních spektroskopických metodOS lokální elektronové mikroanalýzy

Seminář na téma "Nový analytický komplex na bázi REM-JSM 840" (září, 2 dny, Brno)

OS elektronové a iontové spektroskopie

- a) Letní škola iontové spektroskopie (květen, 4 dny, Alšovice)
- b) 4. symposium o fyzice povrchů (září, 5 dnů, Bechyně)

OS hmotnostní spektrometrie

- a) Pracovní schůze - zahraniční přednášející (květen, 1 den, Praha)
- b) Firemní den firmy VG Analytical nebo Kratos/Spectros (červen, 1 den, Praha)
- c) Pracovní schůze na téma "Kvantitativní hmotnostní spektrometrie organických sloučenin" (září, 1 den, Praha)

OS Mössbauerovy spektroskopie

Pracovní schůze na téma "Kryomössbauerovská technika" (září, 1 den, Praha)

OS instrumentálních radioanalytických metod

- a) 11. radiochemická konference (hlavním pořadatelem je odborná skupina jaderné chemie Čs. společnosti chemické) (duben, 4 dny, Mariánské Lázně)
- b) Seminář IAA 87 (září, 3 dny, Klučnice)

OS rentgenové spektrometrie

Pracovní schůze - téma neurčeno (září, 1 den, Praha)

Přístrojová komise

- a) Seminář "Zkušenosti s provozem přístrojů Specord M 40 a M 80" (I. pololetí, 1 den, Praha)
- b) Seminář "Doplňky k přístrojům M 40 a M 80" (II. pololetí, 1 den, Praha)

Názvoslovná komise

těžiště práce na zpracování terminologií : molekulové luminiscenční spektrometrie, zdrojů záření a AAS s elektrotermickou atomizací

Komise referenčních materiálů

těžiště činnosti : zvyšování informovanosti o RM, spolupráce s Komisí pro čs. analytický normál a koordinace prací s dalšími čs. institucemi zabývajícími se metrologií, RM a kontrolou jakosti

Školská komise

Zajištění průběhu soutěže mladých spektroskopiků a spolupráce při pořádání odborných kurzů

VÝSLEDKY SOUTĚŽE MLADÝCH SPEKTROSKOPIKŮ 1985

V roce 1985 se do soutěže mladých spektroskopiků přihlásilo 7 účastníků, z nichž jedna práce nesplňovala podmínky soutěže. Jednotlivé práce byly zaslány vždy dvěma oponentům pracujícím v oboru. Při hodnocení jednotlivých prací byla zvažována aktuálnost problematiky, praktický význam, originalnost a další aspekty. Rozhodování nebylo lehké, protože všechny práce měly velmi dobrou úroveň.

Hlavní výbor na svém 40. zasedání dne 12.12.1985 (viz Bulletin č. 47/1985, str. 3) po zvážení všech kvalit rozhodl udělit :

1. cenu : - RNDr. Janu Hálovi, CSc za práce věnované studiu fluorescenčních spekter pomocí Špolského spektroskopie
- Ing. Antonínu Lyčkovi, CSc za práce z oboru vysoko-rozlišující NMR spektroskopie ^{15}N a ^{119}Sn
2. cenu : - Ing. Vladimíru Mlynárikovi, CSc za vypracování a otestování nového postupu měření a zpracování, které umožňuje získat spin-spinové interakční konstanty ^1H a ^{13}C s jádry s kvadrupólovým momentem

a žádnou 3. cenu.

Vzhledem k tomu, že práce Ing. V. Mlynárika mají i aplikační a praktický význam, rozhodl se hlavní výbor udělit za tuto kvalitu mimořádnou odměnu.

Doc. Ing. Jiří Karhan, CSc

Redakce Bulletinu požádala autory oceněných prací o krátké resumé, které dále uvádíme.

Jan Hála, katedra chemické fyziky MFF UK, Praha :
Nízkoteplotní optická spektroskopie chlorofylu a jemu podobných molekul

Optická nízkoteplotní spektroskopie s vysokým energetickým rozlišením představuje moderní metodu studia elektronově vibračních energetických hladin a přechodů mezi nimi v systémech složitých organických molekul. Na rozdíl od běžných širokopásových (100 až 1000 cm^{-1}) absorpčních a emisních spekter pozorovaných při pokojových teplotách vede snížení teploty (1 až 10K), vhodný výběr nízkoteplotní matrice a použití úzkých laserových čar ke kvalitativní změně. Pozorují se čarová spektra (1 až 10 cm^{-1}) s pásovým fononovým pozadím. Vibrační analýza (VA) těchto spekter poskytuje frekvence normálních vibrací (FNV) a site distribuční funkce (SDF), charakterizující interakci molekuly příměsí s okolím. Využití holeburning techniky umožňuje určovat homogenní šířku optických přechodů, která se pro molekuly porfinů a ftalocyaninů v maticích ztuhlých n-alkanů blíží hodnotě $0,001\text{ cm}^{-1}$.

Serie předložených prací tvoří určitý úsek systematického studia nízkoteplotní optické spektroskopie s vysokým rozlišením (1981-1985), do kterého spadá formulace obecné teorie nízkoteplotních spekter organických molekul zabudovaných v maticích a diskuse jejich speciálních případů : Špolského a site-selektivní spektroskopie pro molekuly H_2 -ftalocyaninu, chlorofylu, feoforbidu, tetrafenylporfyrinu a modelových fotosyntetických systémů (pigment-protein), kde byly kromě určení FNV studovány i SDF odpovídající izolovaným a agregujícím pigmentům včetně systémů pigment-aminokyselina.

Antonín Lyčka, Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice-Rybitví : Soubor prací z NMR spektroskopie

Předložený soubor 13 publikací z oboru NMR spektroskopie řeší problematiku ze tří oblastí :

- a) studium azo-hydrazo tautometrie u azobarviv a E/Z isomerie u hydrazolátek. Byla měřena ^1H , ^{13}C a ^{15}N NMR spektra látek neobohacených a obohacených isotopem ^{15}N a k řešení výše uvedených problémů byly využity příslušné chemické posuny a interakční konstanty $^{\text{N}}\text{J}(^{15}\text{NX})$ [Lyčka A.: Coll. Czech. Chem. Commun. 47, 1112(1982); 48, 3104(1983); 49, 2801(1984); a Kaválek J. 49, 58(1984); a Vetešník P. 49, 963(1984)].
- b) studium koordinace u organocínitých sloučenin. Byla měřena ^{13}C , ^{15}N , ^{17}O a ^{119}Sn NMR spektra diorgano a triorganocínitých sloučenin v nekoordinujících (CDCl_3 , CD_3NO_2) a koordinujících (pyridin, DMSO, HMPTA) rozpouštědlech. K posouzení tetra, penta a hexakoordinace bylo využito zejména ^{119}Sn chemických posunů a interakčních konstant $^{\text{J}}\text{J}(^{119}\text{Sn}^{13}\text{C})$ [Lyčka A., Holeček J., Nádvořník M., Handlíř K.: Coll. Czech. Chem. Commun. 49, 2903(1983); J. Organometal. Chem. 241, 177(1983); 258, 147(1983); 275, 43(1984); 280, 323(1985); 294, 179(1985)].
- c) studium deuteriového isotopového posunu na ^{14}N a ^{15}N chemické posuny u ortho-hydroxyazobarviv a jednoduchých sloučenin obsahujících dusík [Lyčka A., Hansen P.E.: Org. Magn. Reson. 22, 569(1984); Magn. Reson. Chem. 23, 973(1985)].

Vladimír Mlynárik, Čs. metrologický ústav, Bratislava :
Relaxačné časy ^1H a ^{13}C jadier v molekulách, ktoré obsahujú kvadrupolárne jadrá

V predloženom súbore prác sa študujú relaxačné časy ^1H a ^{13}C jadier v molekulách, ktoré obsahujú kvadrupolárne jadrá. Kvadrupolárne jadrá obyčajne rýchlo relaxujú, takže ich nepriama (skalárna) interakcia s ostatnými magnetickými jadrami v molekule sa neprejaví rozštiepením signálov interagujúcich jadier, ale iba ako príspevok k ich spinovo-spinovej relaxácii, resp. k relaxácii v rotujúcej súradnicovej sústave, alebo tiež k spi-

novo-mriežkovej relaxácii. Pre tento relaxačný mechanizmus sa zaužíval názov skalárna relaxácia druhého druhu. Z príspevkov tohto mechanizmu k rýchlosti relaxácie ^1H , resp. ^{13}C jadier je možné vypočítať veľkosť interakčnej konštanty týchto jadier s kvadrupolárnym jadrom.

Uvedený princíp sa využil hlavne pri určení interakčných konštánt ^{13}C jadier s dusíkom, ktoré sú ináč merateľné len na izotopovo obohatených vzorkách, a na zistenie interakčných konštánt uhlík - chlór a uhlík - jód, ktoré sa priamo merať vôbec nedajú.

AKČNÍ PROGRAM ČESKOSLOVENSKÉ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI PŘI ČSAV NA OSMOU PĚTILETKU K ZABEZPEČENÍ ZÁVĚRU XVII.SJEZDU KSČ

Urychlit sociálně ekonomický rozvoj naší společnosti, podstatně zvýšit výkonnost a efektivnost národního hospodářství je nyní náš hlavní cíl, vytyčený XVII.sjezdem KSČ. Úkoly které z toho vyplývají, je nutno chápat v celém jejich revolučním dosahu, jako "hlavní bitevní pole, kde se bude rozhodovat o dalších úspěších socialismu". Na splnění vytyčené ekonomické strategie se váže míra schopnosti naší ekonomiky zvyšovat životní úroveň lidu, splnit náročné záměry v oblasti sociální politiky, ekonomicky podložit přednosti socialismu a posílit jejich vliv na světové politické dění, především na světový revoluční proces.

Politika strany je čestná, vyjadřuje zájmy pracujících, opírá se o jejich podporu. Sjezd zdůraznil, že tomu musí odpovídat i metody práce s lidmi, založené na vztahu důvěry k pracujícím člověku, k jeho tvůrčímu potenciálu, k jeho odhodlání co nejvíce přispívat ke zvýšení našeho společného bohatství.

Maximálně přispět ke splnění závěrů XVII.sjezdu KSČ se stává hlavním cílem a obsahem činnosti Československé spektroskopické společnosti při ČSAV na celé pětileté období. Českoslovenští spektroskopici v předcházejícím období prokázali, že správně chápou úkoly strany a konkrétními pracovními výsledky vyjádřili svůj souhlas a podporu politice strany. Nejinak tomu jistě bude i v současné době, kdy členové spektroskopické společnosti zvýšenou obětavostí, uvědomělou kázní a rozhodností se postaví po bok celé naší společnosti do velkého boje za uskutečnění programu XVII.sjezdu KSČ. V tomto smyslu přijímáme následující úkoly.

1. V oblasti urychlení vědeckotechnického rozvoje

- a) Připravit podklady pro zpracování nové koncepce rozvoje čs.spektroskopie v podmínkách procesu intenzifikace národního hospodářství s horizontem roku 2000.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 30.6.1987

- b) Zabezpečit průběžné zpracování informací prognostické studie v rozhodujících spektroskopických oborech.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : vždy k 30.9.
až do roku 1990

- c) Vypracovat náměty na úkoly plánu vědy a techniky v oblasti spektroskopie pro období deváté pětiletky a dalších létech do roku 2000.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 30.6.1988

- d) Zhodnotit využívání nejnovějších poznatků na čs.spektroskopických pracovištích.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 31.12.1988

- e) Zpracovat návrhy na spolupráci vědeckých, výzkumných a výrobních pracovišť při řešení současných a perspektivních úkolů spektroskopie v ČSSR.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 30.6.1989

2. V oblasti snižování energetické a materiálové náročnosti čs. ekonomiky

- a) Zpracovat a vydat publikaci o zkušenostech a možnostech využívání spektroskopických metod při snižování energetické a materiálové náročnosti v ekonomice.

Zodpovídá : tiskový tajemník
Termín : 31.12.1987

- b) Zorganizovat a vyhlásit soutěž o nejúspěšnější aplikaci spektroskopických metod při snižování energetické a materiálové náročnosti v podnicích a závodech.

Zodpovídá : II. místopředseda
Termín : pro vyhlášení 31.3.1987
a dále každoročně ke stejnému termínu až do roku 1991

- c) Zajistit, aby v programu pracovních schůzí odborných skupin byla věnována zvýšená pozornost využívání spektroskopických metod při snižování energetické a materiálové náročnosti ekonomiky.

Zodpovídá : předsedové sekce
Termín : trvalý

- d) Do hodnocení činnosti odborných skupin zahrnout jak přispívají k prosazování nových spektroskopických metod vedoucích ke snižování energetické a materiálové náročnosti. O dosažených výsledcích informovat každoročně hlavní výbor.

Zodpovídá : předsedové sekce
Termín : 1x ročně při zasedání hlavního výboru

3. V oblasti úspor pracovních sil

- a) Připravit a zrealizovat seminář o podílu spektroskopie při úsporách pracovních sil v předvýrobních i výrobních útvarech

Zodpovídá : II. místopředseda
Termín : 31.12.1988

- b) Zabezpečit, aby v Bulletinu Společnosti byly pravidelně publikovány konkrétní příklady úspor pracovních sil na základě využívání nových spektroskopických metod a nových pracovních metod na spektroskopických pracovištích.

Zodpovídá : tiskový tajemník
Termín : průběžně

- c) Zorganizovat a vyhlásit soutěž o nejlepší výsledky při snižování počtu pracovních sil na spektroskopických pracovištích a při zavádění nových spektroskopických metod.

Zodpovídá : II. místopředseda
Termín : pro vyhlášení 31.3.1987
a dále každoročně ke stejnému termínu až do roku 1991

4. V oblasti rozvoje pracovní iniciativy

- a) Zabezpečit, aby plnění akčního programu bylo podloženo osobními a kolektivními socialistickými závazky.

Zodpovídá : předsedové sekce
Termín : 31.3.1987 a dále průběžně

- b) Pravidelně kontrolovat a hodnotit plnění uzavřených socialistických závazků a o výsledcích informovat hlavní výbor.

Zodpovídá : předsedové sekce
Termín : 1x ročně při zasedání hlavního výboru

- c) V odborných skupinách projednat konkrétní možnost zapojení spektroskopických pracovníků v rámci akcí "Pražské výzvy", případně náměty na vytvoření nových vědecko-výrobních sdružení v oblasti spektroskopie.

Zodpovídá : předsedové sekce
Termín : 31.12.1987 a dále 1x ročně

5. V oblasti mezinárodní spolupráce

- a) Rozpracovat závěry konference zástupců spektroskopických společností a komisí zemí RVHP v Maďarsku 1986 do činnosti Společnosti.

Zodpovídá : I. místopředseda
Termín : 31.12.1986

- b) Zabezpečit účast čs. zástupce pro obor atomové spektroskopie v příslušné komisi RVHP:

Zodpovídá : I. místopředseda
Termín : 30.6.1987

- c) V návaznosti na příslušné dohody zajišťující realizaci komplexního programu vědeckotechnického pokroku členských zemí RVHP do roku 2000 rozvíjet uzavírání konkrétních pracovních dohod se spektroskopickými organizacemi zemí RVHP. Mimořádnou pozornost věnovat rozvoji této spolupráce s SSSR a NDR.

Zodpovídá : I. místopředseda
Termín : průběžně kontrola 1x ročně

- d) V rámci pořádání Československé spektroskopické konference v roce 1988 zajistit mezinárodní účast a orientovat program jednání na aktuální problémy mezinárodní spolupráce v oblasti spektroskopie zvláště zemí RVHP.

Zodpovídá : I.místopředseda
Termín : 30.9.1988

- e) Zásady mezinárodní spolupráce uplatnit při přípravě a uspořádání Evropského kongresu molekulární spektroskopie v roce 1989.

Zodpovídá : I.místopředseda
Termín : průběžně do 30.9.1989

- f) Zabezpečit urychlenou informovanost čs.spektroskopiků o výsledcích jednání mezinárodních spektroskopických konferencí, zejména CSI a CANAS.

Zodpovídá : I.místopředseda
Termín : průběžně

6. V oblasti tvorby a ochrany životního prostředí

- a) Na speciálním semináři zhodnotit podíl čs.spektroskopie a formulovat její nové úkoly v oblasti tvorby a ochrany životního prostředí.

Zodpovídá : II.místopředseda
Termín : 31.12.1988

- b) Zpracovat přehled problémů tvorby a ochrany životního prostředí, které lze řešit aplikací spektroskopických metod.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 30.6.1988

- c) Do programu pracovních schůzí odborných skupin zařazovat seznamování pracovníků s novými spektroskopickými metodami, vhodnými pro aplikace v oblasti tvorby a ochrany životního prostředí.

Zodpovídá : předsedové sekce
Termín : průběžný

7. V oblasti výchovy nových vědeckých, vědeckotechnických a odborných kádrů

- a) Zpracovat koncepci podílu Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV na zajišťování výchovy nových vědeckých, vědeckotechnických a odborných kádrů.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 31.12.1987

- b) Uspořádat speciální seminář pro mladé pracovníky o nejnovějších spektroskopických poznátcích, metodách a možnostech jejich dalšího rozvíjení a využívání.

Zodpovídá : předsedové sekce
Termín : 31.12.1988

- c) Zhodnotit dosavadní výsledky soutěže mladých spektroskopiků a navrhnout opatření k jejímu prohloubení ve smyslu dalšího zkvalitňování výchovy mladých odborníků.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 31.12.1987

- d) Zpracovat komplexní program kurzů a školení pořádaných Čs.spektroskopickou společností v průběhu celé 8.pětiletky a usměrnit ho na rozhodující úkoly rozvoje našeho hospodářství. Zajistit jeho publikaci v Bulletinu.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : 31.3.1987

- e) Uzavřít dohody s vysokými, případně i středními školami na pomoc Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV při zajišťování výuky spektroskopie.

Zodpovídá : vědecký tajemník
Termín : průběžně do 30.9.1988
kontrola 1x ročně

- f) V Bulletinu zveřejňovat informace o studiu vědeckých aspirantů v oboru spektroskopie včetně uvádění termínů obhajob, případně o obhájěných pracích a informace o školících pracovištích v oboru spektroskopie.

Zodpovídá : tiskový tajemník
Termín : průběžný

- g) Vytypovat vhodné mladé pracovníky jako kádrové rezervy pro funkce v rámci Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV a zabezpečit jejich výchovu a přípravu v tomto směru.

Zodpovídá : organizační tajemník
Termín : 30.6.1987 a dále
1x ročně ke stejnému termínu

- h) Provádět pravidelně hodnocení mladých pracovníků vytypovaných jako kádrové rezervy pro funkce ve Společnosti.

Zodpovídá : organizační tajemník
Termín : 30.6.1988 a dále 1x ročně ke stejnému termínu

8. V oblasti řízení a zkvalitňování organizační činnosti

- a) Zhodnotit výsledky organizačního uspořádání Společnosti a předložit návrhy na úpravy s cílem zjednodušení, zpružnění a zkvalitnění organizace.

Zodpovídá : organizační tajemník
Termín : 31.12.1987

- b) Vypracovat soubor opatření k zabezpečení maximální hospodárnosti při zajišťování činnosti Čs.spektroskopické společnosti v průběhu 8.pětiletky.

Zodpovídá : hospodář
Termín : 31.3.1987

- c) Ke zkvalitnění a prohloubení kontroly vypracovat pro každý rok program interních kontrol, zajistit projednání výsledků a vyvozování závěrů ze zjištěných nedostatků i z dobrých příkladů.

Zodpovídá : předseda revizní
komise
Termín : každý rok do 30.11.

9. Rozpracování a kontrola akčního programu

- a) Zajistit, aby akční program byl rozpracován do plánu činnosti celé Společnosti i jejích jednotlivých složek.

Zodpovídá : všichni členové
předsednictva
Termín : 30.11.1986 a dále
vždy k 30.6.

- b) Formou informace v Bulletinu seznámit všechny členy Společnosti s přijatým akčním programem a způsobem jeho zajištění.

Zodpovídá : tiskový tajemník
Termín : 31.12.1986

- c) Zajistit projednání akčního programu na valném shromáždění Společnosti.

Zodpovídá : organizační tajemník
Termín : 31.12.1986

- d) Pravidelně kontrolovat plnění úkolů zařazených v akčním programu i v jeho rozpracování

na úrovni předsednictva čtvrtletně
na úrovni hlavního výboru ročně

Zodpovídá : předseda

- e) Pravidelně v Bulletinu informovat členy Společnosti o plnění úkolů akčního programu.

Zodpovídá : tiskový tajemník
Termín : v souladu s harmonogramem vydávání jednotlivých čísel

- f) Pravidelně informovat příslušné nadřízené orgány o výsledcích plnění úkolů akčního programu.

Zodpovídá : předseda
Termín : 1x ročně

Dr. Jan M r á z

předseda

Čs. spektroskopické společnosti
při ČSAV

SEKCE OPTICKÉ ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE

OS spektroskopie nevodivých materiálů

VIII. seminár o atómovej spektrochémii sa konal v dňoch 27. - 31.1.1986 na Šarpanci, v rekreačnom zariadení SMZ n.p., Košice.

Seminár bol zameraný na problematiku spektrochémie nevodivých materiálov v oblasti stanovenia stopových prvkov s osobitným zameraním na národohospodársky významné prvky vzácnych zemín. Preto bola značná pozornosť pri výbere prednášok venovaná práve prvkom vzácnych zemín, včítane problematiky ich koncentračno-separačného oddeľovania a prípravy.

Výber tém plenárnych referátov bol zameraný na oboznámenie účastníkov s technikou budenia spektier v zdroji ICP a to prevažne prvkov vzácnych zemín, ako aj na problémy využívania automatických spektrometrov s dialogovým programom. Ďalšia časť referátov bola zameraná na teoretické a aplikačné problémy analýzy polutantov životného prostredia, ako aj na problematiku hodnotenia analytických metód využitím výpočtových procedúr teórie informácií. Prímeraná pozornosť bola venovaná aj problematike experimentálnej optimalizácie analytických metód, predkoncentračným postupom a hodnoteniu výkonnosti niektorých novo vyvinutých prístrojov.

Živá a konštruktívna diskusia účastníkov predovšetkým potvrdila správnosť a aktuálnosť tematického zamerania seminára. Organizátori a účastníci sú toho názoru, že ďalší seminár v tejto sérii by sa mal uskutočniť už začiatkom roku 1988.

OS automatické spektrometrie v hutnictví

pořádala ve dnech 10. - 11.2.1986 ve spolupráci s DT ČSVTS Brno symposium firmy Hilger Analytical, jehož se zúčastnilo 115 zájemců, převážně členů odborné skupiny. Program zahrnoval přednášky o přístrojích fy Hilger Analytical, fy Ströhlein a fy Cambridge Instruments z oblasti atomové emisní spektrometrie, AAS, rastrovací elektronové mikroskopie a analýzy plynů. Po přednáškách následovala diskuze a exkurze do laboratoře k.p. Šmeralovy závody Brno.

OS atomové absorpční a plamenové spektroskopie

uspořádala ve dnech 7. - 12.6.1986 v Černé v Pošumaví 10. pracovní seminář o využití AAS ve výzkumu a výrobě, jehož se zúčastnilo 140 členů odborné skupiny a 5 zahraničních hostů: Doc. Dittrich a Dr. Niebergall z NDR, Dr. Barnett z Velké Británie, Dr. Frech ze Švédska a prof. Petrakiev z Bulharska. Jejich přednášky přispěly k celkové vysoké odborné úrovni semináře.

Na semináři odeznělo 40 přednášek, z toho 9 vyzvaných a dalších 7 bylo prezentováno formou posterů. Poměrně velký počet pasivních účastníků je dán velmi rychlým nárůstem počtu přístrojů i pracovišť, které se problematikou AAS nově začínají zabývat a pro něž seminář znamenal skvělou příležitost pro velmi rychlé a kvalitní seznámení s novou metodou.

Programově byl seminář rozdělen do několika bloků, z nichž každý byl uveden vyzvanou přednáškou. Většími ucelenými bloky bylo např. využití platformové techniky v AAS s ETA, modifikátory matrice při elektrotermické atomizaci, korekce pozadí v AAS, problematika kalibrace a slepých pokusů při stanovení stopových obsahů, stopové prvky v biologických materiálech a ověřování spolehlivosti analytických výsledků.

Základním rysem semináře byl veliký nárůst v počtu přednášek věnovaných emisní atomové spektrometrii s indukčně vázaným plazmatem. Jejich počet v budoucnosti pravděpodobně poroste, tak jak bude vzrůstat počet pracovišť, zabývajících se touto sice velmi nákladnou, zato vysoce účinnou technikou. Aktuální zájem o ICP spektrometrii byl na semináři podchycen večerní besedou, která se setkala s velikým ohlasem většiny účastníků. Řízení besedy se ujal prof. Plško a aktivně do ní přispěli další účastníci, kteří pracují s ICP (Dr. Toman, Ing. Streško, Dr. Kubová, Ing. Hlaváček a další).

Celkově je možno konstatovat velice dobrou úroveň všech referátů. Potěšitelná je skutečnost, že řada z nich odráží snahu dovést konkrétní aplikaci k vysoké reprodukovatelnosti a správnosti. Tím se AAS dostává do stadia, kdy na ni není pohlíženo jako na samospasitelnou metodu, ale je chápána v širokém kontextu všech svých výhod i nevýhod.

Pro účastníky byl vydán sborník resumé přednášek (další zájemci o něj se mohou informovat v sekretariátě Společnosti).

SEKCE MOLEKULOVÉ
SPEKTROSKOPIE

OS vibrační spektroskopie

uspořádala ve dnech 13. - 17.1.1986 ve spolupráci s Přírodovědeckou a Matematicko-fyzikální fakultou Karlovy university kurz měření vibračních spekter pro 17 účastníků. Program kurzu zahrnoval teoretické přednášky i demonstrační cvičení. V závěru kurzu byla provedena písemná anketa s účastníky kurzu, která měla podchytit činnost a sféru zájmů účastníků, užívané přístroje a techniky, hodnocení kurzu a návrhy na zlepšení příštího běhu kurzu. Uvádíme dále osnovy základních přednášek.

Milan Horák, Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV, Praha : Využití vibračních spekter

V přednášce byly popsány základní operace, které mohou být v praxi s vibračními spektry prováděny a to charakterizace a identifikace sloučenin, kvantitativní analýza a časově rozlišená spektroskopie. Jako zvláštní oblast aplikací byly popsány způsoby určování struktury molekul a to jak na úrovni empirické, tak i exaktní. V poslední části přednášky byly vysvětleny zásady používání vibrační spektroskopie ke studiu vzájemného působení molekul v různých skupenských stavech. Byly nejprve probrány možnosti měření spekter "standardních" sloučenin (plyny, matice), pak spektra kapalin a roztoků a nakonec krystalů. Jako zvláštní aplikace byly probrány možnosti využití vibračních spekter v makromolekulární chemii.

Laserová spektroskopie

V přednášce byly vytyčeny zásady používání laserů ve spektroskopii. Bylo poukázáno na to, jak se měnily představy o možnostech využití laserů. Prvé aplikace při buzení Ramanova jevu byly založeny jen na představě, že lasery jsou dokonalejší a vhodnější zdroje záření, než klasické výbojky. Další vývoj však ukázal na zcela vyjimečné možnosti laserů, které vedly k objevu nových, nelineárních metod Ramanovy spektrometrie.

Příčiny zvláštností laserů byly vysvětleny na způsobu generace a vlastnostech záření laserů. V další části přednášky byl podán výklad o laserových spektroskopích, s jejichž pomocí je možno dosáhnout vysokého rozlišení, dokonce překonáním Dopplerovy bariery rozšíření spektrálních čar. V poslední části bylo vysvětleno, jak s pomocí laserových spektroskopů možno dosáhnout extrémní citlivosti, dovolující detekovat jednotlivé atomy a umožňující dálkovou detekci molekulárních polutantů přímo v atmosféře.

Ludmila Kubelková, Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J.H.ČSAV Praha : Úvod do FTIR spektrometrie

Přednáška se zabývala základními principy Fourier-transform infračervených spektrofotometrů, které v současné době představují špičkové spektrometrické přístroje nové generace. Z uváděného srovnání s klasickými přístroji disperzními vyplývá, že přístroje nové generace dosahují řádově vyšší citlivosti jak při určování polohy pásů, tak i jejich intenzity, dále se podstatně zkracuje doba měření a je možné dosáhnout i vyšší rozlišovací schopnosti. Na příkladech byla demonstrována jejich aplikace v praxi.

Vladimír Baumruk, Fyzikální ústav UK, Praha : Technika měření Ramanových spekter

Spektrometr pro měření Ramanových spekter - obecné schéma aparatury, geometrie, laserový zdroj, monochromátor, čítač fotonů.

Polarizační měření Ramanových spekter - polarizace rozptylu na nahodile orientovaných molekulách, vztah k symetrii vibrací, polarizace Ramanova rozptylu na monokrystalech.

Rezonanční Ramanův rozptyl - fyzikální princip a vlastnosti, aplikační možnosti, Ramanovy sondy, povrchově zesílený Ramanův rozptyl.

Nelineární metody Ramanova rozptylu - princip čtyřfotonového směšování, metoda CARS, uspořádání spektrometru CARS, aplikační možnosti nelineárních technik měření Ramanova rozptylu.

Stanislav Hilgard, Přírodovědecká fakulta UK, Praha : IČ spektra a jejich popis

Postavení a rozsah IČ oblasti, bližší rozčlenění, druhy energetických excitací, IČ spektrum, vlnočtová stupnice, fotometrická stupnice, fotometrické veličiny, IČ pás a jeho parametry, profilové funkce pásu, pozadí spektra.

IČ spektrometr, princip, stupnice a jejich kalibrace, zdroje chyb

Typy IČ spektrometrů, disperzní IČ spektrometr, jeho hlavní části, zdroje záření, monochromátory, detektory, purgace, klimatizace. Funkce IČ disperzního spektrometru, princip systé-

mu optické nuly, pracovní parametry, šterbinový program, zesílení, časová konstanta, záznamová rychlost, optimální nastavení pracovního režimu.

Testování kvality spektrometru, zdroje chyb hrubých, systematických a nahodilých, kvalita základní linie, vliv zdroje a absorbujících komponent atmosféry, přesnost a správnost vlnočtové a fotometrické stupnice a jejich kalibrace, rozlišovací schopnost, spektrální šíře šterbiny, přístrojová funkce, konvoluce spektra, pravé a zdánlivé parametry pásu, rozptýlené záření, šum a jeho potlačování. Spektrometr typu ratio-recording, jeho princip a přednosti, živá nula, přesnost fotometrické stupnice, zvýšení registrační rychlosti, presample chopping, automatizace obsluhy, pohotovější schopnost komunikace s výpočetní technikou.

Spektrometr, zpracování dat, data stanice a její možnosti

Grafické vyhodnocování parametrů pásu, poloha a absorbance maxima pásu, pološířka pásu, pozadí. Data stanice PE Model 3500, její popis a parametry, aplikační možnosti, praktické příklady, automatické opravy chyb spektrometru, numerické vyhodnocování spekter, programové řízení spektrometru, zpracování dat, akumulace, matematické vyhlazování spekter, diferenční spektroskopie, kvantitativní analýzy, charakterizace a identifikace látek.

Josef Šilha, Přírodovědecká fakulta UK, Praha : Reflexní spektroskopie

Rozdělení reflexní spektroskopie; časový sled rozvoje jednotlivých odvětví.

Výhody reflexní spektroskopie

Vnitřní reflexe - totální odraz

hloubka průniku a faktory jí ovlivňující - pojem odrazivost

Metody založené na jevu vnitřní reflexe - ATR, FMIR

Vliv - vlnové délky

úhlu dopadu

indexu lomu, na kvalitu ATR (FMIR) spektra

Materiály pro ATR (FMIR) spektroskopii; problematika jejich čistoty

Srovnání ATR - FMIR

Výhody FMIR - použití

Spekulární reflexe - princip, zařízení, použití

Jaroslav Pecka, Přírodovědecká fakulta UK, Praha : Užití mikropočítačů ve spektroskopii

1. Záznam a uchování spekter na magnetických médiích. Databanky spekter.
2. Matematické vyhodnocení a zpracování spekter.
3. Řízení spektrofotometru mikropočítačem
4. Mikroprocesor a jeho komunikace s okolím
5. Různé typy v současné době existujících mikroprocesorů

6. Používané typy operačních pamětí (RAM, ROM)
7. Uspořádání mikropočítače, rozdělení paměťové oblasti
8. Data stanice Perkin-Elmer PE 3600 a mikroprocesor Motorola MC 6800.
9. Systémové programy pro PE 3600
10. Programovací jazyky

Bohuslav Strauch, Přírodovědecká fakulta UK, Praha :
Ramanův rozptyl a vztah k infračervené spektroskopii

Úvodem zmíněny historické souvislosti mezi teorií a experimentem v infračervené a Ramanově spektroskopii a jejich vzájemné ovlivňování. Potom věnována pozornost vlastní historii Ramanova rozptylu, principu a teorii jevu. Nastíněno stručně experimentální uspořádání, revoluční přínos laseru. Dále podstata jevu a spektra molekul (vibrační a rotační). Základní výběrová pravidla v Ramanově spektroskopii, konfrontace s výběrovými pravidly v infračervené spektroskopii. Vzájemné doplňování informací při řešení spektrálních úloh. Charakteristická spektra Ramanova a infračervená.

Nepravé pásy, falešné informace, presentace spekter

Uvedeny nepravé pásy, vyskytující se systematicky resp. v určitých vlnočtových oborech, dále pásy nesystematické (náhodné). Zásady presentace spekter v tabulkové a obrázkové formě. Popis obrázků, nutné údaje v obrázcích a tabulkách, základní zásady při vyhodnocování popisu spektra (vše vztaženo na spektra infračervená a Ramanova).

Literatura ve vibrační spektroskopii

Literatura byla vesměs demonstrována. Teorie vibračních spekter, IČ a Ramanova teorie a experiment ve vibrační spektroskopii. Literatura charakteristických frekvencí, atlasy. Dokumentace. Specializované monografie podle technik, skupenských stavů a aplikací.

Václav Šára, Ústav jaderného výzkumu, Řež : Technika měření infračervených spekter

1. Materiály okének pro rozebíratelné, nerozebíratelné a plynové kyvety
 - a) oblasti použitelnosti jednotlivých materiálů
 - b) amatérská renovace povrchů okének
 - c) sestavování a lepení rozebíratelných kyvet
 - d) typy a použitelnost distančních fólií
 - e) popis a funkce kyvety s proměnlivou tloušťkou
 - f) popis univerzální kyvety pro měření spekter při různých teplotách
2. Měření infračervených spekter roztoků
 - a) volba vhodného rozpouštědla
 - b) čištění jednotlivých rozpouštědel

- c) kompenzace spektra rozpouštědla
 - d) vliv koncentrace vzorku a tloušťky kyvety na výslednou kvalitu spektra
3. Měření infračervených spekter nujolových suspenzí
 - a) rozsah použitelnosti nujolové techniky
 - b) příprava suspenze vzorku s nujolem
 - c) příprava suspenzí vzorku s fluorovanými uhlovodíky
 4. Měření infračervených spekter vzorků ve formě KBr tablety
 - a) použitelnost metodiky a popis jednotlivých typů raznic
 - b) čištění KBr
 - c) homogenizace vzorku s KBr
 - d) vliv vlhkosti, tlaku, teploty a doby lisování na výslednou kvalitu IČ spektra
 - e) porovnání metody KBr tablety a nujolové suspenze

OS magnetické rezonanční spektroskopie

uspořádala 24.2.1986 v Brně 29.pracovní schůzi spolu s 15. seminářem NMR za účasti 56 specialistů. Program připravil a řídil Ing.Miroslav Kasal, CSc. Úspěch semináře se odrazil v usnesení účastníků, aby odborná skupina pořádala seminář s obdobnou tematikou nejméně 1x za dva roky.

Uvádíme resumé přednesených příspěvků.

Matej Rákoš, Ladislav Ševčovič, KF VŠT, Košice :
Problémy impulzovej NMR vo fyzike tuhých látok

V prvej časti prednášky boli zhodnotené zvláštnosti impulznej techniky, vzájomný súvis FT a CW spektroskopie, a to u NMR aj jiných metód, so zvláštnym zreteľom na fyzikálny výskum tuhých látok. Bola rozobratá otázka, prečo v súčasnej dobe dochádza k rastu významu FT spektroskopie, najmä u tuhých látok. Na dokumentovanie výhod impulzovej NMR spektroskopie pre tuhú fázu bol uvedený ako príklad z pracoviska autorov výskum modifikovaných polypropylénov za použitia T_1 a $T_{1\rho}$. Bol hodnotený význam impulznej techniky pre viacdimenzionálne spektroskopie a pre získanie spektier vysokého rozlíšenia pre tuhé látky. Bola tiež diskutovaná situácia vo výrobe impulzných spektrometrov v cudzine.

V druhej časti prednášky bol prezentovaný impulzný spektrometr NMR pre tuhú fázu, skonštruovaný na KF VŠT v Košiciach, v spolupráci s UAM v Poznani (J.Lašanda, L.Ševčovič, K.Jurga). Umožňuje meranie T_1 , $T_{1\rho}$, T_{10} v tuhých látkach pre jadrá ^1H pri 30 MHz, pričom dĺžka 90° impulzu je 2 μs . Potreba registrácie celého signálu voľnej precesie po ukončení rádioimpulzu vyžaduje skrátiť mŕtvu dobu zariadenia na rád μs . Tento problém nerieši ani použitie iných metód (napr. "solid echo"). Bol predložený konkrétny návrh na skrátenie mŕtvej doby zo 14 na 4 μs .

Miroslav Kasal, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno: Širokopásmové výkonové zesilovače pro spektroskopii NMR

Důležitou součástí multinukleárních spektrometrů NMR jsou širokopásmové výkonové zesilovače. V příspěvku byly diskutovány požadavky na parametry výkonových zesilovačů z hlediska šířky pásma ($f_{\max}/f_{\min} = \gamma_{\max}/\gamma_{\min} > 20$), výkonu pro realizaci pole B_1 (10 až 10^3 W) a přenosových vlastností (pulsní nebo lineární přenos). Byly uvedeny poznatky z vývoje širokopásmových zesilovačů s šířkou pásma 4 - 85 MHz a s výkony 10 W a 70 W, které byly vyvinuty v ÚPT ČSAV. Diskutovány byly také problémy podmíněné stability s ohledem na imitační vlastnosti rezonančních sond a problémy spojené s šumem zesilovače při lineárním přenosu. V závěru příspěvku byla uvedena koncepce zesilovače s výkonem 300 W, který je v současné době rozpracován.

L. Hromková, Tesla Brno k.p. : Pulsní generátor pro spektrometr BS 587

Umožňuje programovat 32 časových intervalů o délkách 1 - 1023, řád 0,1 / μ s - 1 sek.

Během každého časového intervalu lze naprogramovat v pozorovacím a dekaplujícím kanálu následující činnosti :

OBS : zapnutí, fáze 0° , 90° , 180° , 270° , přepnutí 2 nastavených výkonových úrovní

DEC : zapnutí, fáze 0° , 90° , 180° , 270° , přepnutí dvou předem nastavených úrovní výkonů. Zadání režimu práce decouple-ru. (BB, kompozitní pulsy, WA, TS), přepnutí 2 hodnot frekvence ofsetu.

Způsob zadávání hodnot časů :

- 1) Číselnou hodnotou (mantisa + exponent)
- 2) Tabulkou času TT1 - TT4 (v libovolném časovém intervalu lze zadat jednu ze čtyř tabulek), tabulka má 20 hodnot.
- 3) Přírůstkem času (v experimentech počáteční hodnotu a přírůstek pro další experiment).
- 4) Pevnou hodnotou, označenou symbolem TT5 - TT9, lze zadávat i násobky, např. 2 TT6.

Způsob zadávání fáze :

- 1) hodnota $F_0 - F_3$, odpovídá fázím $0^\circ \div 270^\circ$
- 2) tabulkou fází $V_0 \div V_9$ do libovolného čas.intervalu

Popis hardwareového uspořádání.

Pulsní generátor je sestaven z československých součástí. Z počítače ADT 4700 je naprogramována jeho paměť RAM s uloženými hodnotami pro jednotlivé intervaly. Spuštění programátoru je z počítače. V rámci probíhající puls- ní sekvence lze naprogramovat jednu smyčku opakování od inter- valu I_x po I_y , celkem 32 000x.

P. Suchý, Tesla Brno k.p., Brno : Číslicové syntezáto- ry pro spektrometr BS 587

Číslicové syntezátory s přímou syntézou jsou velmi per- spektivní bloky moderních pulzních spektrometrů NMR. Tyto syn- tezátory jsou v principu tvořeny speciálním číslicovým počíta- čem, který v reálném čase vytváří vzorky požadovaného výst. sinusového kmitočtu. Výhody využití tohoto typu syntezátoru ve spektrometru NMR jsou : velmi rychlé nastavení kmitočtu s malým krokem bez skoku ve fázi a amplitudě, možnost multi- plexního režimu v kmitočtu i fázi a realizace velmi rychlých fázových změn výstupního signálu.

V příspěvku je hlavně poukázáno na výhody soustředění všech druhů technik NMR s proměnnou fází do obvodů číslicov. synte- zátoru, čímž se výrazně zjednodušuje obvodová složitost ostat- ních bloků při současně vyšší kvalitě signálových tras spek- trometrů NMR.

Bedřich Sedláček, Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha : Jaderná magnetická rezonance a relaxace orientovaných jader

V příspěvku byl podán stručný přehled fyzikálních základů metody jaderné magnetické rezonance orientovaných jader a struč- ný přehled používaných experimentálních technik. Dále byly dis- kutovány možnosti nerezonančního měření jaderné spin-mřížkové relaxace při velmi nízkých teplotách.

Metoda jaderné magnetické rezonance orientovaných jader, při níž je rezonanční signál tvořen změnami prostorové anizo- tropie jaderného záření orientovaných radioaktivních jader, přináší značné zvýšení citlivosti ve srovnání s tradičními radiofrekvenčními technikami NMR. Je předurčena především pro studium rezonance velmi řídké rozptýlených radioaktivních jader v kovové matici. Spolu s nerezonančními metodami měření spin-mřížkové relaxace může být využita zejména pro měření jaderných momentů a hyperjemných anomálií radioaktivních jader a rovněž pro studium elektronové struktury, magnetických vlast- ností, hyperjemných interakcí a uspořádání kovových systémů.

J. Englich, M. Pfeffer, Matematicko-fyzikální fa- kulta UK, Praha : Některé problémy pulsní NMR v magneticky uspořádaných látkách

V referátu byla podána stručná informace o některých mož- nostech využití metody NMR pro studium elektronové struktury a magnetického stavu magneticky uspořádaných látek a o princi- piálním uspořádání pulsního spektrometru NMR pro měření v pás- mu 5 až 100 MHz.

V magneticky uspořádaných látkách se atomová jádra nachá- zejí v efektivním (hyperjemném) magnetickém poli o velikosti řádu 10 - 100 T, které je důsledkem magnetické interakce mezi jádry a elektrony vlastního i okolních atomů.

Distribuce hyperjemného pole získaná měřením spektra NMR a jeho dynamické složky, které lze získat měřením relaxačních

dob, je možno využiť pro studium elektronové struktury zkoumaných látek.

Při měření v nulovém vnějším magnetickém poli je možno rozlišit signál jader atomů v doménových stěnách příslušné magnetické struktury. Toho lze využít ke studiu magnetické struktury a dynamických vlastností doménových stěn.

Měřením v dodatečném vnějším magnetickém poli je možno studovat magnetickou strukturu zkoumaných látek, případně určit jaderný γ - faktor.

Pro všechna výše uvedená měření byl navržen spektrometr NMR vlastní výroby, který vykazuje následující základní technická data. Spektrometr je koncipován jako širokopásmový v kmitočtovém pásmu 5 - 100 MHz. Excitační část umožňuje generování radioimpulsů $T \geq 1 \mu s$ o úrovni $P_{vf} \leq 100 W$. Přijímač je typu "up-konvertor" s dvojitým směřováním se šumovým číslem cca 1,5 dB. Mezifrekvenční kmitočet je volitelný 2,10 a 105 MHz s měnitelnou šíří pásma $B = 10 kHz$ až 5 MHz. Ve snaze o zhotovení autonomního systému, umožňujícího plně koherentní provoz, byl spektrometr postaven do jednotky "Camac". Jedinými měřicími externími přístroji jsou vyhodocovací paměťový osciloskop a počítač. Počítač umožňuje jednak zpracování výsledků a zlepšit odstup signál/šum tzv. středováním, jednak řídí chod celého spektrometru v případě, kdy není spektrometr řízen manuálně.

Zenon Starčuk, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno:
Využití spinového echa v NMR tomografii

Projekce sloužící v NMR tomografii ke konstrukci obrazů jsou v současné době získávány téměř výhradně zpracováním spinového echa a nikoliv FIDu. Spinové echo je vytvářeno buď inverzí gradientního pole nebo buzením posloupností několika v pulsu s neselektivním nebo selektivním účinkem. Každý způsob vytváření spinového echa je spojen s řadou problémů. Předmětem sdělení byla diskuse těchto problémů.

Igor Goljer, Michal Hruškovíc, Centrální laboratorium chemické techniky CHTF SVŠT, Bratislava: Metoda trojité rezonance s využitím kruhového zmiešavače

Dekapling viacerých spinov v spinovom systéme súčasne môže v niektorých prípadoch viesť k zjednodušeniu NMR spektra. Experimentálna realizácia však vyžaduje viacero rozdielnych frekvencií súčasne. Nejjednoduchší spôsob získavania dvoch rozdielnych frekvencií je modulácia vysokofrekvenčného nosného signálu ν_{RF} nízkofrekvenčným harmonickým signálom ν_{IF} . Moduláciu možno uskutočniť použitím vyváženého kruhového zmiešavača typu UZ-07. Kruhový zmiešavač zabezpečuje potlačenie nosného signálu ν_{RF} , pričom na jednom z jeho výstupov získame signály

$$\nu_{RF} \pm \sum_{k=1}^{\infty} k \nu_{IF}$$

Amplitúda signálov klesá s rastúcim k . Ako bolo namerané experimentálne cca 60% energie je rozdelené do signálov s $k=1$.

Vyvážený kruhový zmiešavač bol zabudovaný do spektrometra JEOL FX 100 na generovanie požadovaných signálov v dekaplovacom kanáli spektrometra. Amplitúdovo najintenzívnejšie frekvencie s $k=1$ sme využili na simultánne ožarovanie ^{13}C satelitov protónovej časti spektra $CHCl_3$. Pri nízkej hodnote amplitúdy sme namerali šesť signálov v ^{13}C NMR spektre. Pri nízkych hodnotách amplitúdy možno zabudovaný dekapling použiť na viacnásobný spin tickling. So zvyšovaním amplitúdy dekaplovacieho poľa sme pozorovali komplikovanejšie spektrum AX spinového systému.

Jan Pelnař, Ústav organické chemie a biochemie ČSAV, Praha: Měření homogenity v pole měřící cívky s využitím gradientního ss pole

Znalost rozložení v pole B_1 v měřící cívce sondy NMR spektrometru je důležitá nejen z hlediska citlivosti experimentu, ale zvláště u moderních pulsních metod, které vyžadují přesné nastavení délky pulsu (např. π puls) v celém objemu vzorku. Problematika homogenity B_1 pole nabývá na důležitosti u spektrometrů se supravodivým magnetem, které v sondách užívají cívek sedlového typu s horší homogenitou vytvářeného pole ve srovnání se solenoidními cívkami sond klasických magnetů. Baxovu metodu, využívající jednoduchý dvoudimenzionální experiment v gradientním magnetickém poli, nebylo možno použít vzhledem ke značným fázovým distorzím jednotlivých spekter v první doměně. Byla proto vypracována metoda měření, která vychází ze stanovení hodnot sklápěcích úhlů pulsu pro lokální extrém NMR linie v gradientním magnetickém poli. Metoda využívá souboru jednodimenzionálních spekter, která jsou nezávisle fázově korigována. Výsledný normovaný tvar NMR linie souboru izolovaných spinů bez interakce v gradientním poli o velikosti gradientu G (Hz/m) byl odvozen ve tvaru

$$A(f) = \frac{\alpha(\frac{f}{G})}{\alpha(0)} \cdot \sin \alpha(\frac{f}{G}) \quad (1)$$

kde $\alpha(\frac{f}{G})$ je velikost sklápěcího úhlu pulsu v měřící cívce ve vzdálenosti $z = \frac{f}{G}$ od středu cívky, $\alpha(0)$ je velikost sklápěcího úhlu ve středu cívky. Lokální extrém průběhu NMR linie jsou dány vztahem

$$\frac{d\alpha(\frac{f}{G})}{df} \cdot [\sin \alpha(\frac{f}{G}) + \alpha(\frac{f}{G}) \cdot \cos \alpha(\frac{f}{G})] = 0 \quad (2)$$

První člen tohoto vztahu $\frac{d\alpha(\frac{f}{G})}{df}$ je roven nule ve středu měřící cívky (vzhledem ke geometrické souměrnosti), z druhého členu $\alpha(\frac{f}{G}) = -\tan \alpha(\frac{f}{G})$ byly určeny velikosti sklápěcích úhlů a

(a tedy velikosti pole B_1) pro jednotlivé lokální extrémy průběhu linie. Odvozené výsledky byly ověřeny pro teoretické rozložení v pole B_1 a simulované NMR linie a použity pro praktické proměření průběhu v pole B_1 v cívkách různých typů sond spektrometru Varian XL 200.

Ivan Krejčí, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno, Jindřich Běluša, Tesla Brno k.p. : Systémy pro stabilizaci a homogenizaci magnetického pole řízené počítačem

Pro výhodné vlastnosti číslicových obvodů samočinné regulace byly systémy jaderného stabilizátoru a automatického doladování homogenity magnetického pole řízeny mikropočítačem. Kromě základních řídicích funkcí zajišťuje mikropočítač i další činnosti zabezpečující zlepšení obsluhy při přípravě experimentu a odolnost systému panelu proti nesprávnému zásahu obsluhy. V jaderném stabilizátoru je použit algoritmus PID regulátoru s rozdělením větve PD (proporcionálně-derivační) a I (integrační). Integrační větve regulátoru se chová vůči poruchám jako učící se systém.

Dvoupaprskový optimalizátor homogenity magnetického pole používá k řízení gradientů Y a Y2 metodu deformovaných mnohostěnů pro prvotní vyhledání optimálních korekčních proudů a metodu vycházející ze statistických vlastností signálu pro obnovené hledání extrému homogenity magnetického pole během experimentu.

Oba popsané systémy automatického řízení jsou použity ve spektrometru 80 MHz ÚPT ČSAV a BS 587 firmy Tesla.

J. Haláček, P. Plánek, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Dvouprocesorový výpočetní systém NMR pro BS 587

Systém je tvořen spojením dvou plnohodnotných počítačů ADT 4700. Zpracovávající počítač je nadřazený, na jeho V/V sběrnici je napojen akviziční počítač (podřízený). Akviziční počítač řeší samostatně řízení spektrometru, sběr a předzpracování dat. Pouze přístup na disk je řešen přes nadřazený počítač. Nadřazený počítač je standardní verze ADT, podřízený se liší v základních mikroprogramech a ovládacím panelu. V nadřazeném počítači je operační systém DOS V, podřízený počítač je bez operačního systému, jsou zde pouze absolutní programy NMR. V příspěvku byly zahrnuty základní parametry NMR dvouprocesorového systému a popsána odlišnost od současného jednoprocesorového systému. Pozornost byla zaměřena na grafiku využívanou barevný TV přijímač a digitální potenciometry.

Vladimír Húsek, Vladimír Sklenář, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Fázové posuny radiofrekvenčních signálů v NMR spektroskopii : Využití a technická realizace.

Moderní metody pulsní NMR spektroskopie využívají v roz-

sáhlé míře radiofrekvenční signály s různým fázovým zpožděním. V příspěvku byly zhodnoceny možnosti vytváření jak kvadraturních fázových posunů ($0, 90^\circ, 180^\circ$ a 270°), tak i posunů s obecnými fázovými úhly. Pozornost byla věnována požadavkům na přesnost fází a amplitudovou vyváženost fázové posunových radiofrekvenčních signálů, které vyplývají z jednotlivých oblastí metodických aplikací. Detailně byl popsán jednoduchý fázovací obvod pro vytváření signálů s fázovým posunem $0^\circ - 180^\circ$ a velmi přesným vyvažováním amplitudy rf signálů. Tento obvod se úspěšně uplatnil při realizaci moderních technik širokopásmového dekaplinku využívajících složených radiofrekvenčních pulsů. Další část příspěvku se zabývala možnostmi využití digitální syntézy pro generaci obecných fázových posunů. Přepínáním kmitočtu ofsetového syntezátoru během pulsní sekvence je možné realizovat velmi přesně libovolně malé fázové posuny rf signálů. Na metodách vícekvantové filtrace ^{13}C NMR spekter byly demonstrovány možnosti tohoto způsobu generace fázových posunů radiofrekvenčních signálů.

J. Jelínek, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Spektrometry NMR se supravodivými magnety

Snímání NMR spekter v polích vytvořených supravodivými magnety s indukci vyšší než 2 T, která již nejsou dosažitelná elektromagnety s budicími cívkami a železným magnetickým obvodem, má výhody ve zvýšení chem. posuvu a tím zjednodušení interpretace spekter, ve vyšší citlivosti, výhodnějším poměru s/š, možnosti práce se vzorky větších objemů, výborné časové stabilitě, neustálé provozní připravenosti, po nabuzení v nenáročném obsluze a velmi ekonomickém provozu prakticky bez přímého nároku na elektrickou energii (pro celodenní provoz se spotřebuje necelých 10 kWh na výrobu kapalných plynů, které se za den vypaří).

Komerčně je již z KS dostupná celá řada NMR spektrometrů s frekvencemi 100 až 500 MHz, což odpovídá indukcím 2 - 12 T. Současné technologicky zvládnuté supravodivé materiály dovolují prakticky vytvářet pole o indukci do 18 T (pro 750 MHz), jsou dokonce známy supravodiče s krit. indukcí až 50 T, zatím z technologických důvodů nepoužitelné, dovolující potenciálně pracovat až do frekvencí 2 GHz. Supravodivé magnety jsou umístěny v lázni kapalného helia ve speciálních kryostattech s vertikální nebo horizontální průchozí teplotu pracovní dutinou. Pro NMR spektrometrii se užívají většinou vertikální kryostaty s dutinami průměru 40 - 100 mm (standard asi 55 mm), magnety s horizontální pracovní dutinou jsou určeny spíše pro NMR tomografii, mají pole o indukci 0,5 - 5 T, dutiny o průměru 100 až 1000 mm. Základní homogenita v oblasti vzorku, jehož objem může být 1 cm^3 až např. $30\,000 \text{ cm}^3$ je řádu 10^{-5} , pro spektrometrii vysokého rozlišení se efektivní homogenita zvyšuje soustavou supravodivých a klasických korekcí, navíc obvykle rotací vzorku až na $10^{-9} - 10^{-10}$. Časová stabilita magnetického pole (magnet v perzistentním stavu, odpojen od zdroje) je 10^{-7} až $10^{-8}/\text{h}$, což odpovídá časové konstantě více než

1000 let a znamená to, že magnet není třeba po léta dobuzovat, má vlastnost jakéhosi permanentního magnetu. Tomu odpovídá současná koncepce heliových kryostatů s velmi nízkými ztrátami kryokapalin. U kvalitních kryostatů se denně doplňuje asi 3 - 6 litrů levného LN₂ a pouze asi 0,1 až 0,4 l LHe, takže jedna náplň vydrží několik měsíců.

Byly diskutovány požadavky na instalaci supravodivého magnetu s ohledem na prostor, blízké železné objekty, nezbytné kryotechnické vybavení, potřebu kryokapalin při uvádění do provozu, provozní spotřebu, ekonomické aspekty sběru a komprimování odpařeného He při současné ceně plynu 100 Kčs FCO/m³.

V ÚPT ČSAV bylo vyvinuto a úspěšně realizováno 5 supravodivých magnetů pro NMR s indukci 4 - 7 T s velmi dobrou časovou stabilitou a efekt. homogenitou řádu 10⁻⁸ až 10⁻⁹. Dva z nich jsou v dlouhodobém provozu, jeden pracuje v NDR rok s 270 MHz aparaturou pro vysoké rozlišení v pevné fázi. Výroba a vývoj supravodičů pro vytváření polí do cca 9 T je zajištěna ve SVÚM Praha a Kablu n.p. Kladno. Vývoj a výroba He kryostatů v ÚPT ČSAV Brno a Feroxu k.p. Děčín. Vývoj a výroba supravodivých zdrojů magnetického pole v ÚPT ČSAV a v Tesla Brno a konečně vývoj a výroba finálního zařízení 200 MHz NMR spektrometru se supravodivým magnetem se opět řeší ve spolupráci ÚPT ČSAV a Tesla Brno.

Karel Bartušek, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno:
Pulsní gradienty magnetického pole

Cílem přednášky bylo shrnout požadavky na buzení gradientů magnetického pole tak, aby umožňovaly využít metody selektivního buzení na klasickém spektrometru.

Gradienty magnetického pole jsou využívány v těchto oblastech: aplikace homospoile impuls, v měření difúzních koeficientů, v metodách využívajících selektivního buzení a v NMR tomografii. Ze všech těchto oblastí vyplynuly požadavky na vlastnosti buzených gradientů.

Bylo popsáno rozšíření spektrometru FTNMR 80, vyvinutého v ÚPT ČSAV o systém buzení gradientů s širším zaměřením na pulsní gradientní zdroje, jejich vlastnosti a zajištění stability.

Vzhledem k požadavku náběžných a doběžných hran gradientního pulsu byla popsána metoda měření tvaru impulsů magnetického pole v pracovním prostoru spektrometru.

Karel Švéda, Oldřich Chramosta, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno: Vyhodnocování konfigurace polarizačních polí

Pro stanovení konfigurace magnetického pole v dané oblasti je nutné znát vektor magnetické indukce v jejich jednotlivých bodech. Při NMR experimentech má tento vektor v celé uvedené oblasti v podstatě pouze jedinou složku označovanou B₀ = B_z, zbývající B_x a B_y jsou u dobrých magnetů o 5 i více

řádů menší. Velikost B_z složky vyhovuje Laplaceově rovnici, jejíž řešení je jednoznačně určeno hodnotami na okraji uvažované oblasti (Dirichletův problém). Není tedy nutno měřit hodnoty B_z v celém objemu oblasti stačí změřit je pouze na jejím povrchu a získanými daty proložit vhodnou regresní funkci. Sestavení a řešení soustavy normálních rovnic se značně zjednoduší a urychlí volbou válcového tvaru měřicí oblasti, symetrickými polohami měřicích bodů a použitím souboru sférických funkcí pro lineární regresi (metodou nejmenších čtverců). Zvolený soubor funkcí a jim odpovídající koeficienty nalezené regresi, jejichž počet je menší než počet naměřených dat, tvoří matematický model pole. Model umožňuje kvalitativní i kvantitativní posouzení konfigurace zkoumaných polí, usnadňuje úvahy o příčinách jejich nehomogenity či odchylek od žádaného tvaru, dovoluje sledovat vliv zásahů do magnetických obvodů na tvar pole, navrhopvat vhodné korekční obvody atd. Pomocí modelu můžeme vypočítat B_z - složku magnetické indukce v libovolném bodě měřicí oblasti, kreslit mapy a znázorňovat průběh pole v různých rovinách a podél zadaných úseček. Změnu konfigurace pole při aplikaci vybraných korekčních obvodů lze modelovat úpravou koeficientů u odpovídajících sférických funkcí. Je možno sestavit i modely B_z - složky polí korekčních a gradientových vinutí. Program pro zpracování a výpočty modelových polí je napsán v jazyku BASIC pro počítač hp 9835A. Na semináři byly demonstrovány některé aplikace modelu a předvedeny mapy nekorigovaných polí elektro - i supravodivého magnetu.

OS spektroskopie pevného stavu

uspořádala v rámci své 29. pracovní schůze přednášku a diskusi na téma "Přenos energie v dielektrických krystalech". Schůze se konala dne 23.4.1986 ve Fyzikálním ústavu ČSAV a zúčastnilo se jí 12 členů odborné skupiny. Monotematické zaměření schůze, které vyvolalo bohatou diskusi k problematice, bylo zvoleno proto, že při studiu fotoluminiscence je vedle měření emisních a excitačních spekter, polarizačních vlastností emitovaného záření, teplotní závislosti intenzity emitovaného záření důležité zajímat se i o kinetické vlastnosti (doba života excitovaných stavů luminiscenčních center, způsoby přenosu absorbované excitační energie k centru), které doplňují znalosti o elektronové struktuře zkoumané látky. Ve své přednášce shrnul Ing. Nikl teoretické modely, užívané k interpretaci experimentálních výsledků. Na konkrétním případě PbCl₂ provedl rozbor kinetických parametrů, které porovnal s těmito teoretickými modely.

Úplný text přednášky byl zařazen do 48. čísla Bulletinu, který byl věnován spektroskopii pevného stavu.

Ve dnech 2. - 4.6.1986 uspořádala odborná skupina spektroskopie pevného stavu seminář "Využití synchrotronového záření ve vědě a praxi", který se konal v Alšovicích u Železného Brodu. Seminář organizačně řídili Ing. Vladimír Cháb, CSc a Dr. Milena Závětová, CSc.

Přinášíme úvodní slovo k semináři RNDr. Jaromíra Hrdého, CSc z Fyzikálního ústavu ČSAV a stručné obsahy jednotlivých přednášek.

Jaromír Hrdý, Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Využití synchrotronového záření ve vědě a praxi

V posledních dvou desetiletích jsme svědky mohutného rozvoje využívání synchrotronového záření především ve fyzikálních, ale stále více i chemických a biologických vědách, v medicíně i technice. K několika desítkám již existujících zdrojů synchrotronového záření přistupují další velké projekty, jako na př. 6 GeV akumulární prstence v USA a Francii, akumulární prstence o energiích 2 GeV v Brazílii, 1,8 GeV v Jerevanu, 1,5 GeV v USA, Itálii a NSR. Další menší zdroje synchrotronového záření projektují Indie, Tchaj-wan a Japonsko.

Současné zdroje synchrotronového záření dosahují průměru od několika desítek metrů až po pouhých několik cm. (Tyto malé synchrotrony s pulsním polem jsou určeny pro litografii). V ČSSR je aktivita v tomto směru soustředěna převážně ve Fyzikálním ústavu ČSAV v Praze, který spolupracuje s centrem synchrotronového záření v Novosibirsku. Někteří pracovníci však získali zkušenosti i z jiných pracovišť synchrotronového záření v NSR a Velké Británii. To, že zájem o využívání synchrotronového záření z jiných pracovišť je minimální, je jistě způsobeno nedostupností zdroje synchrotronového záření v ČSSR, ale podle našeho názoru i malou informovaností především pracovníků nefyzikálních oborů o možnostech, které synchrotronové záření poskytuje.

Uvážíme-li, které země dnes již vlastní zdroje synchrotronového záření (USA, Velká Británie, Francie, Švédsko, NSR, Itálie, SSSR, Čína, Japonsko), pak je zřejmá potřeba zdroje synchrotronového záření, který by byl i co do vzdálenosti snadno dostupný evropským socialistickým zemím. Proto se v současné době zvažuje projekt výstavby zdroje synchrotronového záření v ČSSR. Před námi stojí úkol informovat širší vědeckou a technickou veřejnost o možnostech, které synchrotronové záření poskytuje a upřesnit si názor na budoucí potřebu synchrotronového záření u nás. Úkolem semináře je k splnění tohoto úkolu přispět.

Vladimír Cháb, Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Užití synchrotronového záření ve fotoelektronové spektroskopii

Záření emitované relativistickými nabitými částicemi pohybujícími se ve statickém nebo slabě se měnícím magnetickém poli, nesoucí název synchrotronové záření (SZ), se stalo velmi účinným prostředkem ve výzkumu základních fyzikálních, chemických a biologických jevů. Toto záření je emitováno ve směru

okamžité rychlosti částice do úzkého kuželu. Jeho intenzita je nepřímo úměrná čtvrté mocnině hmoty urychlované částice. Mezi nejvíce oceňované vlastnosti SZ patří :

- Vysoká intenzita, vysoký stupeň polarizace a spojitý charakter spektra v oboru od radiových frekvencí až do obou tvrdých rentgenových paprsků.
- Silná kolimace záření v rovině dráhy, která vzrůstá se vzrůstající energií částic.
- Pulsní charakter záření s dobou trvání záblesku řádově několik ns
- Vznik SZ za podmínek UHV

Pro většinu experimentů, mezi nimi i pro fotoelektronovou spektroskopii, je nutné spojitě SZ monochromatizovat. Ve fotoemisních experimentech měříme počet emitovaných elektronů připadajících na jeden dopadající foton jako funkci různých parametrů - energie a polarizace fotonů, energie a moment emitovaných elektronů. SZ umožňuje prakticky kontrolovat všechny tyto parametry. Informace nesená emitovaným elektronem je především povrchového charakteru v důsledku silného neelastického rozptylu elektronů s kinetickou energií mezi 10 - 1000 eV (obor fotoemise). Tento rozptyl je energeticky závislý - proto SZ, díky své laditelnosti, nám umožňuje i určit tloušťku zkoumané povrchové oblasti, tím zesílit nebo zeslabit povrchový či objemový příspěvek ve spektru. Většina fyzikálních a chemických vlastností úzce souvisí s rozdělením elektronů podle energií v pevné látce. V procesu fotoemise je elektron emitován z obsazeného pásu pod Fermiho hladinou do prázdného stavu, který se liší od energie počátečního stavu o energii rovnou dopadajícímu fotonu. SZ dovoluje odděleně určit hustotu obsazených elektronových stavů a hustotu prázdných koncových stavů. Tento postup není možný ve fotoelektronové spektroskopii s klasickým zdrojem záření, kde získaná informace je vždy dána průměrem obou hustot (tj. obsazené počáteční a prázdné koncové). Měření úhlové závislosti fotoemise ve spojení s těmito technikami může být použito k přímému ověření dispersních křivek závislosti energie elektronu na vlnovém vektoru (pásová struktura), a to jak pro povrchové, tak i pro objemové stavy.

SZ umožnilo dále nové aplikace i v oblasti určování povrchových struktur. Fotoelektrony emitované z pevné látky s kinetickou energií v rozmezí 20 - 300 eV vykazují obdobné difrakční efekty, jaké známe z povrchové krystalografické metody difrakce pomalých elektronů (LEED). Sledováním intenzity emise z určitého elektronového stavu v závislosti na energii dopadajícího budícího záření lze získat informace o vzájemném geometrickém uspořádání atomů substrátu a adsorbovaných molekul či atomů. Tato informace je obzvláště cenná při zkoumání velmi slabě integrujících systémů.

Petr P a n ě o š k a, katedra chemické fyziky MFF UK, Praha : Některé perspektivy využití synchrotronového záření v chemických aplikacích

Synchrotron je třeba považovat za unikátní a universální zdroj elektromagnetického záření, dovolující realizaci celého

komplexu spektroskopických metod, které umožňují studovat vlastnosti molekul, molekulárních systémů i materiálů. I když jsou stejné metody realizovatelné samostatně, se speciálními konvenčními zdroji, poskytuje synchrotron, kromě většinou nesrovnatelně lepší kvality, hlavně unikátní a konvenčně nedostupné kombinace spektroskopicky zajímavých parametrů tohoto záření. Jde o :

- široký interval dostupných vlnových délek (od rentgenového záření, přes vakuovou ultrafialovou, viditelnou až k infračervené oblasti),
- vysokou intenzitu tohoto záření s hladkou a relativně plovlnou spektrální závislostí,
- pulsní charakter s typickou dobou trvání pulsu 100 ps při vysoké stabilitě energie pulsu, s pravidelnou a vysokou opakovací frekvencí, umožňující provádět efektivní akumulaci měřené veličiny,
- minimální prostorovou divergenci svazku,
- polarizaci (lineární v rovině orbitu, vlevo a vpravo kruhovou nad a pod touto rovinou).

V oblasti rentgenového záření ze synchrotronového zdroje lze oproti konvenčním přístrojům pro určování struktury molekul a molekulárních systémů využít :

- laditelnosti zdroje k řešení fázového problému bez nutnosti přípravy derivátů s těžkými atomy
- malé divergence svazku ke studiu krystalů extrémně malých rozměrů
- vysoké intenzity a pulsního charakteru k měření časově rozlišených rentgenových struktur (teoreticky zachytitelné jsou změny v nanosekundové oblasti !)

Metoda XAFS, realizovatelná prakticky pouze se synchrotronovým zdrojem záření umožňuje mj. studovat i detailní uspořádání aktivních center enzymů, katalyzátorů ap. (konformaci, meziatomové vzdálenosti, orientaci ap.).

Rozsáhlé možnosti aplikací při unikátním využití výše uvedených vlastností jsou ve studiu vlastností a struktury polymerních materiálů, amorfních systémů roztoků aj.

V oblasti VUV je kromě možnosti realizace fotoelektronové spektroskopie zajímavá možnost studia výšeenergetických elektronových přechodů molekul, které jsou nedostupné z technických důvodů při použití klasických přístrojů (např. oblast $\pi \rightarrow \pi^*$ přechodů bílkovin a peptidů, aminokyselin, nukleových kyselin aj.). Unikátní možnosti poskytuje využití pulsního charakteru a polarizace synchrotronového záření pro studium kinetik konformačních změn molekul v roztocích i in vivo pomocí časově rozlišené polarizované fluorescenční spektroskopie, případně studia časově rozlišených spekter cirkulárního dichroismu.

Synchrotronové pracoviště je navíc místem vysoce efektivní a nutně intenzivní mezioborové spolupráce odborníků všech odvětví přírodních i technických věd i aplikovaného výzkumu, jejíž nezbytnost a obecnou prospěšnost pro všechny zúčastněné není jistě nutno zdůrazňovat.

Radomír Kužel, katedra fyziky polovodičů MFF UK, Praha:
Synchrotronové záření v rentgenové difrakci

Synchrotronové záření se začalo výrazněji uplatňovat v rentgenové difrakci teprve koncem sedmdesátých let, ale zato způsobilo její renesanci. Unikátní vlastnosti tohoto záření - vysoká intenzita, široký spektrální obor, vysoký stupeň polarizace a přirozené kolimace svazku umožňují nejen podstatné urychlení a zpřesnění mnoha klasických difrakčních experimentů, ale především dovolují provádět experimenty kvalitativně nové. Užití synchrotronového záření znamená velký přínos pro všechny oblasti rentgenové difrakce, zvláště ve spojení s energeticko dispersními a pozičně citlivými detektory. Činí vysoce efektivní metodu XED (energeticko dispersní rtg. difrakci) s rozlišením dle vlnových délek), která nevyžaduje pohyb vzorku ani detektoru a poskytuje celé difrakční spektrum najednou v krátkém čase (\sim sekundy). Lze tak dobře provádět strukturální studium za extrémních podmínek, jako jsou vysoké tlaky a vysoké a nízké teploty, či sledovat kinetiku fázových přechodů. Otevírá se celá oblast dynamických procesů, které je možné zkoumat v reálném čase při zachování bohatství informace obsažené v difrakčním spektru, při jejím omezení až s nanosekundovým rozlišením. Synchrotronové záření umožňuje výrazně zlepšit rozlišení, čímž se odhaluje možnost studia efektů, které byly dříve schovány za hranicí experimentálních chyb (celá oblast práškové difrakce, difúzní rozptyl, či zcela nové studium velmi tenkých vrstev, neelastický rozptyl, magnetický rozptyl). Lepší rozlišení a vysoká intenzita rozšiřují podstatně možnosti malouhlového rozptylu. Kromě jiného, laditelnost záření unadňuje určování struktur metodou anomálního rozptylu, studium tenkých vrstev difúze a gradientů.

Oldřich Smotlacha, Fyzikální ústav ČSAV, Praha :
Studium struktury amorfních látek

Pro studium struktury amorfních látek se u nás dosud téměř výhradně používala metoda rentgenové difrakce. Fourierův obraz experimentální křivky poskytuje průměr radiální hustoty atomů, vztažený ke všem atomům v látce obsaženým. Jeho interpretace je značně obtížná a může vést k nejednoznačným závěrům. Alternativní možností je studium jemné struktury absorpčního koeficientu ve vzdálené oblasti za absorpční hranou (EXAFS - Extended X-ray absorption fine structure). Tato jemná struktura je odrazem uspořádání atomů v okolí prvku, jehož hrana je studována. To umožňuje určit uspořádání vůči jednotlivým prvkům v látce obsaženým, a navíc lze při dostatečné přesnosti měření a vhodném způsobu zpracování naměřených dat dokonce indentifikovat atomy obklopující atom prvku zkoumaného. Nevýhodou této metody je skutečnost, že jemná struktura absorpčního koeficientu tvoří maximálně procenta jeho celkové hodnoty, což přináší velké nároky na přesnost měření. Měření je dále ztíženo tím, že na rozdíl od difrakčních experimentů nelze využít intenzivních čar charakteristického záření rentgenky. Při využití brzděného záření je dosažení žádané přesnosti nemožné pro jeho příliš nízkou intenzitu. Velikých potenci-

álních možností metody EXAFS lze využít pouze prostřednictvím akumulčních prstenců, které jsou zdrojem dostatečně intenzivního a laditelného synchrotronového záření.

Jindřich Chval, Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Studium pevných látek metodou kvantových výtěžků

Jednou z metod užívaných ke studiu elektronové struktury pevných látek je měření rtg. absorpčních pásů. Závislost absorpčního koeficientu na energii dopadajícího záření přináší informaci o rozdělení parciální hustoty neobsazených elektronových stavů. V dlouhovlnné oblasti rtg. spektra (jednotky až desítky nm, což odpovídá energii stovek až desítek eV) je ale velmi obtížné a někdy i nemožné připravit velmi tenké vzorky nutné pro absorpční měření v této oblasti.

V těchto případech lze s výhodou použít metodu kvantových výtěžků. Metoda je založena na měření závislosti fotoemise elektronů (energeticky nerozlišených) na energii dopadajícího rtg. záření. Experimentálně bylo zjištěno a teoreticky podloženo, že tato závislost blíže koresponduje se závislostí absorpčního koeficientu na energii dopadajících fotonů.

Při použití klasických rtg. zdrojů se u těchto metod setkáváme s problémem nízké intenzity spojitého záření a z toho vyplývajícími neúnosně dlouhými měřicími časy, případně zne-možněním měření. Tyto problémy lze částečně odstranit užitím rtg. lamp s rotační anodou.

V poslední době je ve fyzice pevných látek využíváno intenzivního zdroje spojitého spektra - synchrotronového záření. Synchrotronové záření je výhodné také pro dlouhovlnnou rtg. oblast a otevírá široké možnosti pro aplikaci metod kvantových výtěžků. I při užití akumulčních prstenců pracujících s nižší energií (stovky MeV) lze měření zkrátit na dobu řádu minut a mít tak k dispozici operativní metodu pro studium neobsazených elektronových stavů.

Vladimír Starý, Mikrobiologický ústav ČSAV, Praha : Využití metody EXAFS při interakci elektronů s látkou

Užití synchrotronového záření vedlo k rozvoji metody EXAFS. Tuto metodu je možné užít při elektronovém buzení elektronových spekter. Přitom se sleduje kolísání intenzity proudu prošlých, odražených a emitovaných (sekundárních nebo Augerových) elektronů za zvolenou absorpční hranou studovaného prvku. I když podmínky měření jsou poněkud odlišné vzhledem k elektronovému buzení, metodika zpracování i výsledky jsou obdobné metodě EXAFS.

Hlavním výsledkem je radiální distribuční funkce atomů kolem zvoleného typu centrálního atomu. Zatím co citlivost a přesnost těchto metod je výrazně menší než u EXAFS, je lokální rozlišení, zvláště při studiu elektronů prošlých tenkými vrstvami, principiálně lepší než u metody EXAFS. Možnost sledovat nehomogenity je spojena s možností zobrazení studovaného místa vzorku. Metoda může být využita především pro lehké prvky; shora je omezena atomovým číslem 20 (pro K absorpční

hranu) a 40 (pro L absorpční hranu). Další výhodou je možnost měřit předávání hybnosti při srážkách primárních elektronů s elektrony vnitřních slupek, standardní příprava vzorků pevných látek i biologických vzorků a možnost užití standardního zařízení - elektronového mikroskopu s analyzátozem energií prošlých elektronů. Nevýhodou je nutnost pracovat ve vakuu, překryv oblastí EXAFS jednotlivých prvků při složitějších vzorcích a omezení tloušťky vzorku.

Protože v Československu existují již nejméně dva elektronové mikroskopy s analyzátozem energie prošlých elektronů, bylo by možné tyto metody pro tenké vzorky začít používat okamžitě. Pro odražené a emitované elektrony je možné tyto metody začít vyvíjet na existujících zařízeních.

Milena Závětová, Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Synchrotron - zdroj infračerveného záření

V daleké infračervené oblasti je nedostatek dostatečně intenzivních zdrojů záření. Synchrotronové záření jako intenzivního pulsního zdroje infračervených fotonů poprvé úspěšně použili v roce 1984 J. Yarwood et al. v Daresbury (GB). Jasné a intenzivní záření má navíc vysoký stupeň polarizace a je silně kolimováno. Je laditelné a umožní překlenout oblast mezi mikrovlnami a dalekým infračerveným zářením. Jeho vynikajících vlastností lze využít např. při experimentech s vysokotlakými komorami a všude, kde je nutné mít velice úzké intenzivní svazky nebo tam, kde je nutné subnanosekundové časové rozlišení. Nabízí se i mnoho aplikačních možností v chemii, fyzice a biologii.

Eduard Krouský, Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Měření K absorpční hrany céru pomocí dvoukrystalového spektrometru s vertikální disperzí

Jednou z možných metod studia struktury a elektronových stavů v pevných látkách je rentgenová absorpční spektroskopie. Cílem našich experimentů je určit změny elektronové struktury a uspořádání atomů prvků ze skupiny vzácných zemin vyvolané tlakem, případně různou valencí prvků ve sloučeninách.

Využití synchrotronového záření v rentgenové absorpční spektroskopii je výhodné především z hlediska vysokého jasu zdrojů synchrotronového záření. Tento fakt nabývá na významu zejména při použití tlakových komor, které mají všeobecně nízkou světelnost.

Byly zvažovány různé typy spektrometrů a jejich varianty z hlediska jejich světelnosti, rozlišení, disperze, kompatibility spektrometru, tlakové komory a zdroje synchrotronového záření a specifických podmínek při experimentech se synchrotronovým zářením. Na základě tohoto rozboru jsme se rozhodli realizovat dvoukrystalový spektrometr s vertikální disperzí, který má dostatečnou rozlišovací schopnost, vysokou, i když nelineární, disperzi (jestliže měříme v oblasti úhlů vertikální divergence φ do $\sim 10^\circ$), vlnová délka difraktovaná spektrometrem není ovlivněna polohou zdroje synchrotronového záření.

Základ spektrometru tvoří dva proříznuté ("channel-cut") krystaly a systém šterbin. Krystaly jsou umístěny na společném stolku. Po najustování krystalů v antiparalelní (disperzní) poloze na požadovanou vlnovou délku, jsou oba krystaly zafixovány a vlnová délka λ_{ψ} propouštěná spektrometrem se mění v závislosti na úhlu ψ natočení stolku s krystaly kolem horizontální osy kolmé na svazek záření a průsečnici difrakčních rovin obou krystalů ($\lambda_{\psi} = \lambda_0 \cos \psi$, λ_0 je vlnová délka difraktovaná pro $\psi = 0$).

Pro měření K absorpční hrany céru byly použity monokrystaly Si a difrakční roviny (111) (ve 3.řádu), resp. (115) (v tomto případě odpadají problémy s difrakcí jiných řádů). Rozlišení činí v tomto případě $\Delta E = 0,26$ eV (K abs.hrana céru je $\sim 40,5$ keV).

Při úvodních experimentech, jejichž cílem bylo především ověřit funkci nového typu spektrometru, byly změřeny K absorpční hrany Ce, $Ce_2(C_2O_4)_3$, $CeCl_3$ (valence 3^+) a $Ce(SO_4)_2$, CeO_2 (valence 4^+). U uvedených sloučenin byl zjištěn posun K absorpční hrany oproti kovovému céru 5, 6, 11 a 16 eV.

Závěrem lze říci, že i když 1.varianta dvoukrystalového spektrometru má ještě některé konstrukční nedostatky, měření na prstenci VEPP 4 v Novosibirsku prokázala, že tento typ spektrometru je vhodný pro přesná rentgenová absorpční měření pomocí synchrotronového záření.

Oldřich Renner, Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Současný stav rentgenové litografie

Rentgenová litografie je jednou z alternativních metod pro vytváření elektronických obvodů s velmi vysokým stupněm integrace. Její podstatou je kvazikontaktní kopírování struktur vytvořených v maskách na podložky pokryté rezistem. Paprsky emitované intenzivním zdrojem měkkého rentgenového záření dopadají na membránu, která nese absorbér - vrstvu zlata o tloušťce menší než $1 \mu m$, v níž byla elektronovou litografií zformována příslušná struktura. Po průchodu maskou dopadají paprsky na rezist a vyvolávají v něm chemické změny, které se projeví odlišnou odolností osvětlených a neosvětlených oblastí vůči leptání. Výsledkem litografického procesu je šablona, která chrání odcloněná místa při dalších technologických operacích.

Z analýzy litografických schémat a ze studia depozice energie v rezistech vyplývá mezná rozlišovací schopnost rentgenové litografie a produktivita příslušných systémů. V referátu byly kriticky shrnuty vlastnosti používaných zdrojů, masek, rezistů a soukrytovacích systémů, byly vymezeny oblasti použití jednotlivých prvků.

V současné době lze vysledovat tři trendy rozvoje rentgenové litografie, které souvisejí s typy použitých zdrojů záření. První směr zahrnuje systémy, které využívají konvenčních zdrojů. Aparatury této skupiny jsou vesměs určeny k expozici desek o průměru až 150 mm, přičemž nejmenší šířka čar

činí $0,5 \mu m$ a produktivita 10 - 20 desek/hod. Druhý směr je spjat se specializovanými zdroji synchrotronového záření, při testovacích zkouškách prototypových aparatur bylo dosaženo rozlišení $0,2 \mu m$. Předpokládá se, že systémy založené na využití kompaktních akumulačních prstenců a rentgenových stepperů budou v 90.letech používány k velkosériové výrobě integrovaných obvodů. Třetí směr konečně počítá s využitím plazmatických zdrojů, které jsou levnější a provozně jednodušší než akumulační prstence; měly by se uplatnit zejména při výrobě malých sérií součástí.

Hlavní předností rentgenové litografie je relativní jednoduchost přenosu submikrometrových struktur - odpadá řada problémů, s nimiž se potýká litografie optická či elektronová (difrakční a interferenční jevy, blízkostní efekt atd.). Rentgenová litografie se již poloprovodně využívá při výrobě rychlých obvodů (VHSIC); její hromadné nasazení je však podmíněno dořešením problémů spojených s vývojem jednotlivých prvků, především rentgenových masek.

Jiří Kub, Fyzikální ústav ČSAV, Praha : Využití SZ v rentgenové topografii

Rtg.topografie je difrakční metoda na zviditelnění, identifikaci a studium vlastností poruch téměř dokonalých monokrystalů. Protože kontrast na jednotlivých poruchách je pozorovatelný v oblasti desítek až stovek μm , je maximální hustota pozorovatelných defektů omezena (pro dislokace asi na $10^4/cm^2$). Rtg.topografie je vhodná pro studium dislokací, precipitátů, malouhlových hranic, blokové a doménové struktury krystalů a všech ostatních nehomogenit způsobujících distorzi mříže. Vhodný a někdy i nezbytný doplněk k interpretaci topogramů je měření difrakčních křivek.

Rtg.topografické metody dělíme na jedнокrystalové, kde svazek záření dopadá ze zdroje na zkoumaný krystal, a vícekrystalové, ve kterých svazek dopadá na vzorek až po difrakci na jednom či dvou krystalech a má proto dobře definované vlastnosti.

Použití zdroje SZ s vlnovými délkami $0,03 - 0,2$ nm v oblasti jedнокrystalové topografie přináší značné zjednodušení experimentu, urychlení expozic až 10^4 x a zlepšení prostorového rozlišení. Snadnost a rychlost získávání topogramů by umožnila využití SZ i k technologické operativní kontrole při zpracování monokrystalů apod. Dostatečně vysoké intenzity záření dovolují také zejména ve spojení s televizní technikou dynamická studia reálné struktury (pohyb dislokací, fázové přechody, růst krystalu).

Vícekrystalové topografické metody s použitím SZ jsou experimentálně mnohem náročnější, mohou však přinášet unikátní informace o subtilnějších poruchách, tenkých vrstvách, vlastnostech povrchu apod.

Úroveň rtg.topografie v Československu slibuje využití výhod SZ i v této náročné oblasti.

Libuše Pajasová, Petr Pajas[†], Fyzikální ústav
 ČSAV, Praha : Využití synchrotronového záření ke studiu optických konstant polovodičů

V rámci spolupráce při využití synchrotronového záření (SZ) mezi ČSAV a AV SSSR provádíme již od roku 1980 společně s pracovníky Ústavu polovodičů SO AV SSSR na akumulačním prstenci VEPP-2M (s energií 0,7 GeV) v ÚJF SO AV SSSR v Novosibirsku zkoumání optických konstant polovodičů.

Ve vakuovém ultrafialovém oboru spektra je SZ prakticky jediným dostatečně intenzivním a spojitým zdrojem záření, vhodným pro spektroskopická měření. Možnost rozšířit oblast studia optických přechodů v polovodičích o oblast přechodů z úzkých atomárních kórů dovozuje zkoumat individuální rozdělení hustoty neobsazených stavů v III - V polovodičích.

V oboru malých reflektivit $\sim 2\%$ stanovujeme optické konstanty z Fresnelových vzorců na základě měření odrazivosti v závislosti na úhlu dopadu. Vysoký stupeň polarizace záření umožňuje měřit jak podélnou tak příčnou složku odrazivosti jednotlivě.

Měření provádíme zejména pro III - V polovodiče s mechanicko-chemicky opracovanými povrchy nebo přirozené povrchy připravené epitaxi molekulárních svazků. Současně se zabýváme sledováním rovinnosti a mikrohruhosti povrchů. Vliv těchto faktorů, i jiných povrchových vrstev na odrazivost je velmi složitý.

Přesto, že měření na VEPP-2M se provádí v tzv. parazitickém režimu, výsledky podobné kvality by sotva mohly být získány bez synchrotronového záření. Jsou v dobrém souladu s jinými experimenty, na jiných zdrojích SZ, a porovnáváme je s teoretickými výpočty lokálních hustot neobsazených stavů, prováděnými ve FzÚ ČSAV.

[†]externí spolupráce při vývoji programového zabezpečení

Zdeněk Prášil, Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů, Praha : Možnosti využití synchrotronového záření pro studium radiačních efektů v pevné fázi

Využití synchrotronového záření, zejména jeho nejtvrďší rentgenové složky, znamená významné rozšíření možností studia účinků ionizujícího záření, tj. v oblasti radiační fyziky a chemie. Jak známo, trvalé (nebo alespoň dlouhodobé) radiační defekty v pevné fázi vznikají v důsledku tvorby bodových defektů a jejich různých kombinací. Tyto procesy mají výrazný energetický práh při energii elektronů řádově 10^5 eV. Existují však také tzv. podprahové procesy, ke kterým dochází i při účinku fotoelektronů o nižší energii. Mechanismus těchto procesů není dosud podrobněji prostudován, přestože jeho objasnění by výrazně přispělo k teorii radiačních procesů v pevné fázi. Právě při řešení těchto problémů se může významně uplatnit synchrotronové záření, zejména v důsledku jeho relativně vysoké intenzity (vysoké dávkové rychlosti) a laditelnosti energie. První práce o tvorbě barevných center v monokrystalech anorganických látek vlivem synchrotronového záření byly

již publikovány. Studium radiačních poškození jednotlivých komponent optické trasy při využití synchrotronového záření ve spektroskopii má význam pro zajištění spolehlivosti těchto zařízení a pro případné prodloužení jejich životnosti.

SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

OS instrumentálních radioanalytických metod

IAA 86 - Konference o instrumentální aktivační analýze se uskutečnila v Klučenicích ve dnech 4. - 8.5.1986 za účasti 54 odborníků.

Při zahájení konference bylo vzpomenuo padesáté výročí formulace principu aktivační analýzy G.Hevesym a H.Leviovou a stručně uvedeny etapy vývoje této metody.

Na konferenci bylo předneseno 35 příspěvků, které se zabývaly především metodickými problémy

- instrumentální neutronové aktivační analýzy
- analytického využití promptního záření gama resp. částic z jaderných reakcí neutronů s atomovými jádry
- radionuklidové rentgenfluorescenční analýzy
- aplikace radioanalytických metod
- aplikované spektrometrie záření gama.

Výsledky, o nichž bylo referováno, jsou využívány v oblasti geologie, biologie, lékařství, kontroly provozu jaderných elektráren, metalurgie, elektroniky, metrologie a archeologie.

Účastníci konference v závěrečném jednání upozornili na nezbytnost zajištění potřebných podmínek a kapacit pro ozařování v jaderném reaktoru během rekonstrukce reaktoru VVR-S. Dále byl dohodnut porovnávací pokus se syntetickými prvkovými standardy pro INAA mezi našimi laboratořemi (materiál zpracuje a vyhodnotí Dr.J.Frána, CSc).

V průběhu konference byly promítnuty kopie filmů z archivu Ústavu pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů (ÚVVVR). Byl to filmový dokument z návštěvy Marie Curieové-Sklodovské v Československu v červnu 1925 a krátký film o výrobě radiových solí v tehdejší jáchymovské továrně na výrobu radia. Po promítání promluvil ředitel ÚVVVR Ing.B.Fridrich o vývoji a perspektivách ústavu, který navazuje na tradice a činnost bývalého Státního ústavu radiologického, založeného krátce po první světové válce.

Spolupodatelé byla OS jaderné chemie Čs.společnosti chemické při ČSAV a Čs.komise pro atomovou energii.

Pro účastníky byly vydány "Souhrny referátů konference o instrumentální aktivační analýze - IAA 86".

Zájemci o tento sborník se mohou informovat v sekretariátu Společnosti.

OS hmotnostní spektrometrie

7.mezinárodní symposium PETROMASS'86 bylo organizováno společně s Vysokou školou chemickotechnologickou v Praze a Chemopetroleum, k.p. Spolana Neratovice. Konalo se ve dnech 1. - 5.9.1986 v rekreačním středisku Vodních staveb Ústí nad Labem v Harrachově. Symposia se zúčastnilo na 60 specialistů, z toho 7 z SSSR, 2 z NDR, 2 z PLR a 6 z BLR. Celkem bylo předneseno 19 přednášek z oboru použití hmotnostní spektrometrie při analýzách ropných produktů. Z metodického hlediska zaujala především přednáška Dr.Taraněnka z SSSR, který předložil konstrukci nového iontového zdroje, umožňujícího selektivní usměrnění molekulárních iontů do analyzátoru s využitím úhlové disperse fragmentů vznikajících jejich rozpadem.

Symposia PETROMASS jsou dosud jedinými mezinárodními symposii v oboru hmotnostní spektrometrie v rámci zemí RVHP. Zastoupení Čs.spektroskopické společnosti přítomností vedoucího odborné skupiny hmotnostní spektrometrie mělo význam pro realizaci záměru rozšíření spolupráce odborných skupin hmotnostní spektrometrie v rámci zemí RVHP.

OS Mössbauerovy spektroskopie

Tomáš Zemčík, Ústav fyzikální metalurgie ČSAV, Brno : Mezinárodní seminář o aplikacích Mössbauerovy spektroskopie ve fyzice kovů a fyzikální metalurgii

Seminář "Aplikace Mössbauerovy spektroskopie ve fyzice kovů a fyzikální metalurgii" uspořádal ve dnech 12. - 16.května 1986 ve Valticích v hotelu Hubertus Ústav fyzikální metalurgie ČSAV v Brně ve spolupráci s Katedrou jadrovej fyziky a techniky EF SVŠT v Bratislavě a OS Mössbauerovy spektroskopie Čs.spektroskopické společnosti.

Úvodní jednání semináře bylo věnováno slavnostní schůzi OS Mössbauerovy spektroskopie při příležitosti 25 let trvání Mössbauerovy spektroskopie v ČSSR. S pozdravným projevem vystoupil akademik P.Ryš, historii zavedení a aplikací metody zrekapituloval prof.Ing.J.Ciráček, DrSc. O své vzpomínky na začátky Mössbauerovy spektroskopie v ČSSR na pracovištích MFF UK a ÚJF v Řeži se s účastníky semináře podělila RNDr.J.Dlouhá, CSc, autorka naší první a dosud jediné monografie věnované této metodě (J.Dlouhá : Mössbauerův jev a jeho využití, Praha 1968). Za výbor ČSSS vystoupil předseda sekce speciál-

ních spektroskopických metod Ing.V.Hulínský, CSc. Připomenul dosavadní činnost početně sice menší, ale zato velice agilní OS Mössbauerovy spektroskopie a její podíl na rozvoji spektroskopických metod. Na závěr svého vystoupení předal děkovné dopisy předsedy Čs.spektroskopické společnosti třem členům, kteří se významnou měrou zasloužili o zavedení Mössbauerovy spektroskopie do výzkumu i praxe v ČSSR, a to Prof.Ing.J.Cirákoví, DrSc, Doc.Ing.J.Sitkovi, CSc a RNDr.T.Zemčíkovi, CSc.

Odborný program semináře byl zaměřen na aplikace Mössbauerovy spektroskopie při studiu hyperjemných interakcí v kovech a slitinách, magnetických vlastností, fyzikálních charakteristik ocelí a technických materiálů, rychle kalených slitin, magnetických oxidů a minerálů a dále na nové a nekonvenční experimenty. Celkem odeznělo 43 příspěvků, z toho 9 pozvaných referátů, 15 krátkých sdělení a 19 účastníků prezentovalo poster. K vysoké úrovni programu výrazně přispěla účast řady odborníků světové úrovně z dané oblasti. Zejména pozvané hlavní referáty představovaly současné špičkové poznatky. Cenná byla i možnost přímého srovnání úrovně československého výzkumu s ostatními zastoupenými zeměmi. V příspěvcích československých účastníků se dosti výrazně projevila užší vazba základního výzkumu na řešení otázek blízkých potřebám praxe a menší možnosti orientace na atraktivnější fyzikální problémy.

Jako velmi cennou součást odborného programu lze hodnotit rozsáhlou a podnětnou diskusi k většině referátů. Bylo na ni vyhrazeno dostatek času jak v rámci jednání, tak mimo něj.

Průběh semináře bezesporu přispěl k dalšímu rozvoji aplikací Mössbauerovy spektroskopie v ČSSR i k oživení kontaktů mezi pracovišti podobného zaměření, zejména v zemích RVHP, kde se většina pracovníků potýká s těžkostmi s výjezdem na podobné mezinárodní akce mimo tyto země. Uspořádání semináře bylo z jejich strany často oceňováno s přáním jeho periodického opakování. Vhodným doplňkem odborného programu se ukázala být exkurze na lednické pracoviště Vysoké školy zemědělské v Brně.

Semináře se celkem zúčastnilo 45 osob, z toho 27 z Československa, 8 z Polska, 4 z NDR, 3 z Maďarska a po jednom účastníku z Finska, NSR a SSSR. Omezená kapacita hotelu a počáteční velký zájem se strany sovětských kolegů přinutil organizátory v období přípravy semináře k omezení jeho propagace v ostatních zemích.

V rámci společenského programu semináře bylo uspořádáno posezení ve vinném sklípku, prohlídka valtického zámku a některých zajímavostí v nejbližším okolí Valtic. Každý účastník obdržel výtisk souhrnu abstraktů prezentovaných příspěvků, který byl vydán Ústavem fyzikální metalurgie ČSAV v Brně.

Organizačně a technicky byla celá akce dobře zajištěna. Účastníci vyslovovali uspokojení s celkovým zajištěním, programem i volbou místa konání. Poděkování za to patří zástupcům všech tří pořadatelských institucí, kteří vytvořili dobře spolupracující tým.

OS rentgenové spektrometrie

uspořádala ve dnech 2. - 6.6.1986 v Donovalech svůj seminář, kterého se zúčastnilo 55 posluchačů. Bylo předneseno celkem 25 referátů.

Problematika přednesených příspěvků se týkala tří tematických okruhů :

- 1) metrologie (4 referáty)
- 2) výpočetní technika - hardware i software (6 referátů)
- 3) referáty z pracovišť (15 referátů)

Velký zájem vzbudila problematika metrologie, ke které se v průběhu semináře posluchači neustále vraceli a na závěr semináře přijali usnesení doporučit vypracování kritérií pro posuzování nových analytických metod z hlediska jednotných metrologických charakteristik. O vypracování těchto kritérií bylo rozhodnuto požádat Dr.Musila z ÚÚG Praha, který na semináři přednesl plenární přednášku z této problematiky.

K semináři byl vydán sborník resumé, z něhož uvádíme obsah (zájemci o sborník se mohou přihlásit v sekretariátu Společnosti).

Josef Musil, Ústřední ústav geologický, Praha :
Základy metrologie analytické chemie

Mikuláš Matherny, katedra chemie HF VŠT, Košice :
Využitie teorie informácií na výber optimálnej prístrojovej techniky pre analytickú kontrolu v magnezitovom priemysle

Radko Chadima, Výzkumný ústav elektrotechnické keramiky, Hradec Králové :
Příprava vzorků vodivých past na bázi drahých kovů pro rentgenfluorescenční měření

Bohumil Žitňanský, Čs.metrologický ústav, Bratislava :
Referenčné materiály a metrologické overenie RF spektrometrov

Peter Žilka, TK Hutě Škoda k.p., Plzeň :
Softwarové vybavení simultánně-sekvenčního spektrometru 8680 XRF fy ARL

Antonín Povolný, Geologický průzkum n.p. Ostrava, závod Brno :
Řízení chemické laboratoře pomocí výpočetní techniky

Václav Macháček, Geoindustria n.p., Praha :
Přehled matematických modelů pro výpočet empirických mezivprvkových koeficientů

Antonín Povolný, Geologický průzkum n.p. Ostrava, závod Brno :
Vliv výběru vstupních dat na správnost kalibrace při různých algoritmech

Otakar Blahož, Marie Krajíčková, VZÚ NHKG, Ostrava :
Nové směry v přípravě vzorků pro RFA

Zdeněk Ersepke, Sklo Union, Valašské Meziříčí :
Některé zdroje a šíření chyb v rentgenspektrální analýze

Petr Koukal, Cementárny a vápenky Brno, závod Mokrá :
Využití SAPI 80 pro vytvoření uzavřené regulační smyčky se spektrometrem XEG - III

Pavel Roubíček, České lupkové a uhelné závody k.p., Nové Strašecí :
Přehled materiálů analyzovaných v rtg. spektrální laboratoři ČLUZ

Radomír Výmola, VVÚ VZUP k.p., Stráž pod Ralskem :
Zkušenosti s rtg. fluorescenční analýzou hlavních složek v horninách

Milada Pelikánová, Ústřední ústav geologický, Praha :
Stanovení titanu a vanadu v geologických materiálech metodou vlnově dispersní rentgenové fluorescence

Jaroslava Waňková, Miroslav Kuba, Výzkumný ústav anorganické chemie, Ústí nad Labem :
Rtg. spektrální analýza vzácných zemin

Jaroslav Čechura, ÚVZÚ k.p. Škoda, Plzeň :
Problematika referenčních materiálů pro RSA vysokolegovaných ocelí

Milan Kern, Viera Balgavá, Ústav radioekologie a využití jadrovej techniky, Košice :
Rádionuklidový rentgenofluorescenční spektrometr a jeho využitie na meranie vzoriek životného prostredia

Václav Helan, Třinecké železářny VŘSR n.p., Třinec :
Využití rentgenfluorescenčního spektrometru ARL 8680 při rozbořech hutních materiálů

Alojz Poldauf, Závody SNP, Žiar nad Hronom :
Rtg. spektrálne metodiky v ZSNP

Václav Hora, VVÚ VZUP k.p., Stráž pod Ralskem :
Zkušenosti s rtg. fluorescenčním stanovením těžších prvků v roztocích

Petr Kolečkář, VZÚ NHKG, Ostrava :
Nedispersní rtg. analyzátor ISOSPEK

Vladimír Buzek, Jaroslav Pitter, Státní výzkumný ústav ochrany materiálu G.V. Akimova, Praha-Běchovice :
Měření tloušťky kovových povlaků na analyzátoru Link MECA 10-44

Aurélia Nemcová, Výzkumný ústav zvěračský, Bratislava :
Röntgenfluorescenční analýza vzoriek zvěracích aerosolov

Pavel Binko, Jan Dupák, Luděk Frank, Petr Vašina, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno :
Projekt rtg. mikroanalyzátoru pro čs. elektronové mikroskopy

OZNÁMENÍ

5. Tagung "FESTKÖRPERANALYTIK"

uspořádá Chemická společnost NDR a Vysoká škola technická Karl-Marx-Stadt v době od 30.6. do 3.7.1987 v Karl-Marx-Stadtu. Informace a vyžádání přihlášek na adrese :

Technische Hochschule
Sektion Chemie und Werkstofftechnik

z.H. Dr.L.Küchler

Postfach 964

9010 KARL-MARX-STADT DDR

12. Tagung "ELEKTRONENMIKROSKOPIE"

uspořádají "Gesellschaft für Topochemie und Elektronenmikroskopie der DDR" a "Physikalische Gesellschaft der DDR/ Fachverband Elektronenmikroskopie" v lednu 1988 (pravděpodobně v Drážďanech).

1. cirkulář bude vydán v I. čtvrtletí 1987.

XXVI. CSI - SOFIA 1989

XXVI. CSI se bude konat v červenci 1989 v Sofii v Národním paláci kultury. Informace a vyžádání přihlášek :

Prof. Dr. A. Petrakiev

Sofia University
Faculty of Physics, Dept. of Optics and Spectroscopy

5. Anton Ivanov Blvd.

BG-1126 SOFIA/BULGARIA

NABÍDKA

Nabízíme k odprodeji tato starší laboratorní zařízení a přístroje :

- 3 ks Digestoře dřevěné typ T 11, rok výroby 1980, neúplné
Cena za kus - 2 500,- Kčs
- 1 ks Jiskrový generátor FEUSSNER, výrobce Karl Zeiss Jena,
typ HF - 01, rok výr. 1959, cena cca 2 500,- Kčs
- 1 ks Spektroprojektor, výrobce Karl Zeiss Jena, typ SP - 2,
rok výr. 1960, cena 1 000,- Kčs
- 1 ks Spektrometr, výrobce Optika Miláno, typ CF 4,
rok výr. 1961, cena dle dohody
- 1 ks Interferometr FABRI-PERRO, výrobce SSSR, rok výr. 1961
cena dle dohody
- 1 ks Mřížkový spektrograf, výrobce Karl Zeiss Jena, typ PGS 2
s příslušenstvím, rok výr. 1961, cena dle dohody
- 1 ks Polarograf, Lab.přístroje Praha, typ LP 60, rok výr. 1964
cena dle dohody
- 1 ks Generátor stejnosměrného proudu, výrobce ÚVVVR, 200 V,
400 A, impuls 10 milisekund, rok výr. 1973
cena cca 2 000,- Kčs

Bližší informace podá s.Kolman, tel. 7096, linka 251

Ústav pro výzkum. výrobu a využití radioizotopů, Praha 10,
Radiová 1

Československá spektroskopická společnost při ČSAV
adresa sekretariátu : 160 00 Praha 6, Kozlovská 1
za ČSSS zodpovídá Dr.M.Fara, CSc
Redakce P.Vampolová. Redakční uzávěrka listopad 1986
Pouze pro vnitřní potřebu