

BULLETIN

ČESKOSLOVENSKÉ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI PŘI ČSAV

ČÍSLO 9

ZÁŘÍ 1971

Dne 2. června 1971 se konalo v Ústředním ústavu geologickém v Praze zasedání Hlavního výboru ČSSS, z něhož uvádíme nejvýznamnější body jednání.

V úvodu zasedání přednesl předseda ČSSS doc dr Eduard Plško DrSc projev k 50. výročí založení KSČ.

Byla schválena zpráva o činnosti společnosti za období 1968 - 1969, která byla předložena Kolegiu chemie a chemické techniky.

Byl projednán stav návrhu na konání Mezinárodního spektroskopického kolokvia v roce 1975 v Československu.

Na místo ing Poláčka, který ze zdravotních důvodů nemůže vykonávat funkci v hlavním výboru, byl schválen dosavadní náhradník HV ing Štefanec.

Předsednictvo společnosti bylo pověřeno řadou úkolů, o jejichž řešení má podat zprávu na příštím zasedání HV. Mezi nejdůležitější patří rozšíření zahraničních styků společnosti, zlepšení služeb členům a návrh ediční činnosti.

Byl projednán plán činnosti společnosti na druhé pololetí roku 1971 a rok 1972, z něhož uvádíme výtah.

Atomová sekce plánuje v druhé polovině roku 1971 a v roce 1972 čtyři pracovní schůze:

14. Bratislava - říjen 1971. Téma: Volba a význam porovnávacích prvků ve spektrochemické analýse.
15. Praha - únor 1972. Téma: Thermochemické reakce v kráterku a transport vzorku do výboje.
16. Bratislava - květen 1972. Téma: Lokální mikroanalýza a snížení meze důkazu.
17. Ostrava - říjen 1972. Téma: Použití samočinných počítačů v atomové spektroskopii.

Pro molekulovou sekci jsou připravovány tyto pracovní schůze:

12. Bratislava - říjen 1972. Téma: Principy metod radiofrekvenční spektroskopie.
13. Praha - únor 1972. Interferometrické metody a informace jimi získané.
14. Bratislava - duben 1972. Téma: Určení termodynamických funkcí ze spektrálních dat.
15. Brno - květen 1972. Téma: Metody a aplikace reflexní spektroskopie.
16. Ostrava - říjen 1972. Téma: Spektroskopické studium povrchů.

Velké množství schůzí připravují zájmové skupiny. Termíny těchto schůzí a jejich program budou členům včas oznámeny.

Z akcí většího rozsahu na období 1971/1972 upozorňujeme na

seminář o NMR technice. Brno - září 1971. Pořádá Ústav přístrojové techniky ČSAV Brno za spoluúčasti s mol. sekcí ČSSS. Časově vázáno na brněnský veletrh.

Konference Interlab 1971. Ostrava - září 1971. V rámci této konference se uskuteční třídní seminář s odbornou náplní z oblasti atomové spektroskopie, především automatické spektroskopie.

Kurs automatické spektroskopie I. Ostrava - únor 1972. První část kursu pro pracovníky v tomto oboru.

Kurs automatické spektroskopie II. Ostrava - duben 1972. Druhá část kursu. Pořádá VZÚ NHKG ve spolupráci s ČSSS.

IUPAC konference o konformačních strukturách. Praha - srpen 1972. Pořádá ústav makromolekulární chemie za spoluúčasti ČSSS.

Seminář o současném postavení vizuální spektroskopie v souboru spektroskopických metod. Praha - září 1972. Pořádá ČSSS.

2. mezinárodní seminář o spektroskopii s vysokým rozlišením. Praha - září 1972. Pořádá Ústav fyzikální chemie ČSAV za spoluúčasti ČSSS.

Symposium o analýze nerostných materiálů optickými metodami. Smolenice - září 1972. Pořádá ČSSS.

ATOMOVÁ SEKCE

Dne 7.6.1971 se konala v zasedací síni závodního klubu ministerstva výstavby a techniky ČSR v Praze 2, Na poříčním právu 1, 13. pracovní schůze atomové sekce ČSSS. Na programu byly přednášky pojednávající o standardních materiálech jako hlavních prostředcích kontroly správnosti spektroskopických metod. Program schůze připravila a pracovní schůzi řídila Dr. A. Nová CSC.

Z. Š u l c e k , ÚÚG Praha: Standardy geologických materiálů

Prvními geologickými standardy byly rudní materiály z oblasti ložiskové geologie, u těchto vzorků byl stanoven jen obsah komerčně důležitých složek. Horninové standardy pro petrochemické a geologické účely vznikly až v r. 1949, kdy byl připraven standardní vzorek granitu G 1 a diabasu W 1. Obě horniny byly původně určeny ke kontrole spektrálních metod, pro nesouhlas výsledků chemických analys byly obecně používány ke kontrole analytických postupů při stanovení hlavní složky i stopových prvků.

Další serie standardu vyrobená v r. 1962 zahrnovala granit G 2, granodiorit, čedič, andesit, peridotit a dunit. Od těchto hornin jsou dnes známy doporučené hodnoty pro většinu přítomných prvků. V současné době je připravována další serie hornin a některých minerálů.

Z dalších významných geochemických standardů je třeba uvést kanadské syenity S1, S2, S3, dále sulfidickou rudu SU 1. Pro nás jsou nejnázem dostupné německé horninové standardy granit, čedič, jílovitá břidlice, vápenec, anhydrit. V poslední době ještě černá břidlice a živcový písek. Pro první čtyři standardy byly udány doporučené hodnoty pro hlavní složky a pro většinu stopových prvků. Francouzské standardy granitů byly připraveny v malém množství a jsou dnes vyčerpány. Jako nové geochemické standardy v dostačujícím množství byly připraveny vzorky dioritu, hadce, bauxitu a disthenu. Pro stopové prvky nejsou zde dosud vydány doporučující hodnoty. Další standardní vzorky je možno získat z Geologické služby v Tanzanii (T 1), z Metalurgického ústavu v Johannesburgu (6 horninových standardů).

V. S i x t a , V. M a c h á ě k , ÚÚG Praha: Kontrola homogenity analytických standardů.

Na základě matematicko-statistické metody - analys rozptylu bylo vypracováno kritérium pro posuzování homogenity standardních vzorků hornin a rud. Testováním shodnosti rozptylu výsledků opakovaného měření jednoho dílčího vzorku a rozptylu výsledků analys dílčích vzorků odebraných z celého

objemu standardního vzorku rozhodneme, zda soubor výsledků a tedy i celý standardní vzorek je homogenní. Nejvhodnější analytickou metodou při posuzování homogenity je pro svou vysokou přesnost, citlivost a časovou nenáročnost RTG-spektrální stanovení. Ze zjištěné tolerované nehomogenity byla dále odvozena za použití studentizovaného rozdělení rozpětí dovolená odchylka paralelních stanovení. Přednáška byla doplněna praktickými příklady.

K. B i ě o v s k ý , VÚČKD, Praha: Problematika výroby a použití standardních vzorků.

Standardní referentní materiál (S.R.M.) je definován jako: materiál s vlastností, jež je jednoznačně definována, rovnoměrně rozložena, přesně a správně stanovena a kompetentní autoritou zaručena. Je určen (a tedy v dostatečném množství dostupný) k zajištění správnosti zkušebních postupů metodou srovnávací.

Je-li uvedenou vlastností váhové % některé složky (prvku), jedná se o S.R.M. složení.

Důležitou a poměrně dobře zpracovanou oblastí jsou S.R.M. kovů v kompaktní formě určené hlavně pro spektrometrii, zejména automatickou.

S.R.M. přispívají k celkové chybě analys chybou analytické křivky. Tato chyba se dále člení na chybu způsobenou jednotlivými nehomogenitami, chybu danou matrix. efektem a chybu stanovení zaručené hodnoty.

Problematika výroby S.R.M. je řízena snahou tyto chyby eliminovat nebo alespoň minimalisovat. Dělí se na fáze

- a) koncepce sady S.R.M.
- b) volba a řízení technologie
- c) určení homogenity
- d) stanovení zaručené hodnoty.

K. K u b o ň , VZÚ NHKG, Ostrava: Spektrometrické normály strusek a žáruvzdorných materiálů.

Ve VZÚ byly vyrobeny spektrometrické a chemické normály strusek a šamotů. Vždy sada o 7 normálech. Je uveden technologický postup výroby, testy homogenity, zkoušky stárnutí a chemické složení normálů.

Normály byly zkoušeny pro rentgenspektrální analýsu, pro emisní optickou spektrometrii a pro spektroskopii. Dále jsou v přípravě normály magnezitů, dinasů a ocelářských strusek. Normály budou postupně ověřovány "kruhovými analýsami" chemickými i spektrometrickými a předloženy komisi čs. analytických normálů ke schválení jako státní.

Činnost zájmových skupin.

Zájmová skupina spektroskopie kovů.

V době od 18. - 23.4.1971 se uskutečnil v hotelu Zátíší, Jánské lázně, kurs základů matematické statistiky pro aplikace ve spektrální analýze, uspořádaný Zájmovou skupinou spektroskopie kovů ČSSR ve spolupráci s ČKD Praha - ÚZ Výpočetní technika a Výzkumný ústav. Kursu se zúčastnilo 76 zájemců. Program přednášek byl rozdělen do tří částí. První nejobsáhlejší se zabývala obecnými základy matematické statistiky, druhá aplikací matematicko-statistických metod ve spektrochemické analýze kovů a ve třetí byli účastníci informativně seznámeni s prací na počítačích s perspektivami dalšího využití statistických metod.

Program kursu tvořily přednášky (6 hod. denně) s praktickou částí (4hod. denně), ve které posluchači řešili příklady vyplývající z přednesené látky. Kurs byl organizačně připraven Ing. O. Staňkovou a přednášeli Ing. K. Píček a J. Mráz.

Podle názoru účastníků byl kurs připraven velmi dobře a byl pro všechny významným odborným přínosem. Účastníci se shodli na účelnosti uspořádání obdobného kursu, který by stávil na zde položených základech a byl zaměřen na konkretizaci korelační a regresní analýsy a matematické statistiky vůbec pro využití ve spektrochemické analýze práškových vzorků a roztoků.

Zájmová skupina plamenové spektroskopie.

V Modře - Pieskoch se konal ve dnech 8. - 10.6.1971 seminář o nových poznatcích v plamenové spektroskopii.

Seminář pořádala zájmová skupina plamenové spektroskopie ve spolupráci s Přírodovědeckou fakultou University Komenského v Bratislavě. Na semináři bylo 47 účastníků, vesměs členů Zájmové skupiny plamenové spektroskopie.

Na programu byly zhruba hodinové přednášky, o které pořadatelé požádali přední odborníky. Mimo to byla přednesena 3 původní sdělení. V rámci semináře se dále konala diskuse o technických a přístrojových problémech, diskuse o příštích podnicích zájmové skupiny a program byl doplněn přednáškou zástupce firmy Perkin - Elmer o novém přístroji model 300. K téměř všem přednáškám se rozvinula diskuse, která pokračovala i mimo formální rámec semináře. Účastníci projevovali nejen živý zájem o přednesené referáty, které pokrývaly relativně úplně problematiku plamenové spektroskopie, ale i slušnou odbornou úroveň. Zejména lze příznivě hodnotit skutečnost, že to lze říci nejen o pracovnících ze škol a vědeckých ústavů, ale i o pracovnících z laboratoří průmyslových závodů.

Seminář se konal v příjemném prostředí učebně rekreačního zařízení University Komenského, což přispělo k dobré pohodě všech účastníků.

I. K l e i n m a n n , Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů, Praha: Vlastnosti vysokofrekvenčních plasmat a jejich využití ve spektrální analýze.

V. S v o b o d a , Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů, Praha: Teoretický průběh fluorescenčních křivek růstu.

D. K o l i h o v á , Vysoká škola chemicko-technologická, Praha: Faktory, ovlivňující zhášení atomové fluorescence v různých prostředcích.

V. S y c h r a , Vysoká škola chemicko-technologická, Praha: Bezplamenové techniky v atomové fluorescenční spektroskopii.

I. J a n o u š e k , ÚVZÚ Škoda Plzeň: Studie o rušivých vlivech hliníku při stanovení vápníku plamenovou spektroskopíí.

I. R u b e š k a , Ústřední ústav geologický, Praha: Mechanismus některých rušivých vlivů v plamenové spektroskopii.

B. M o l d a n , Ústřední ústav geologický, Praha: Srovnání plamenů a grafitové květy HGA 70 jako atomizačních prostředků.

F. B e k , Vysoká škola chemicko-technologická, Praha: Využití plamene vodík-kysličník dusný v emisní plamenové spektroskopii.

J. M u s i l , Kovohutě Mníšek: Srovnání plamenů acetylen-vzduch a acetylen-kysličník dusný při aplikacích atomové absorpční spektroskopie v metalurgii.

E. M a r t i n y , Geologický ústav SAV, Bratislava a V. S t r e š k o , Přírodovědecká fakulta University Komenského, Bratislava: Plamenová spektroskopie v geologii a geochemii.

O. M o h y l a , ČSUP - Geologický průzkum, Příbram: Stanovení antimonu v půdních vzorcích pro geochemickou prospekci.

J. L e n c , VÚ elektrotechnické keramiky, Hradec Králové: Zkušenosti s využitím extrakce APDC/MIBK v analýze elektrokeramických materiálů.

L. M i n a ř í k , Geologický ústav ČSAV, Praha: Problémy stanovení barva v silikátech plamenovou spektrometrií.

Resumé přednášek neuvádíme, protože všechny budou v nezkráceném znění publikovány ve Sborníku, jehož vydání se plánuje na konec roku 1971.

Záimová skupina rentgenospektrální analýsy.

Šestá pracovní schůzka se konala 11. března 1971 v ÚKDDŠ v Praze a byla připravena a řízena Dr. J. W a ň k o v o u CSc.

Na programu byly přednášky:

M. N e h a s i l , prom. fyz., SAZ 211, Praha: Zjišťování složení tenkých rovinných vrstev FeNi pomocí rtg spektrální analýzy.

V úvodu byl vytyčen úkol, který je třeba při analýze tenkých vrstev řešit a byly naznačeny cesty, kterými je možno postupovat při užití rtg spektrální analýsy.

Jedním ze způsobů, jak dosáhnout cíle, je početní odvození vztahů pro vybuzené intenzity a závislost těchto intenzit na koncentracích zjišťovaných prvků. Tento způsob byl předmětem přednášky.

Současně bylo poukázáno na některé nutné korekce naměřených intenzit s ohledem na parazitní intenzity.

Na závěr byla stručně objasněna práce Dr. W e y l a , podle které je možno měřit nejen složení, ale i tloušťku vrstvy (za předpokladu, že hustota vrstvy a kompaktního kovu se rovnají).

V. M a c h á č e k , ÚÚG Praha: Rentgen-spektrální stanovení 15 stopových prvků v silikátech.

Bylo referováno o rentgenospektrálním stanovení As, Ag, Cu, Cr, Mo, Nb, Ni, Pb, Sn, Sr, U, Y, Zn a Zr ve stopových obsazích v horninách. Mez detekce je prakticky u všech prvků 0,001 % s výjimkou uranu a chromu. U chromu je mez detekce 0,0005 % a u uranu jen 0,0025. Rozsah metody je u všech prvků od meze detekce do 0,25 %.

Velmi podrobně byl u každého dílčího stanovení sledován vliv prvků, které mohou svoji přítomností rušit stanovení. V úvahu byly brány pouze prvky, které se mohou vyskytovat v horninách ve vyšších koncentracích. Pro ty prvky, které jsou metodou stanoveny a ruší stanovení jiných prvků, byly stanoveny vzájemné faktory.

Přesnost metody byla kontrolována zjištěním směrodatné odchylky při 10ti násobném stanovení shora uvedených prvků v kaolinu ze Sedlece a fonolitu z Olešnice. Správnost stanovení byla kontrolována mezinárodními standardy a příp. srovnáním výsledků chemické a rentgenspektrální analýsy.

7. pracovní schůzka se konala 26. a 22. května 1971 v ÚKDSS v Praze. Kromě přednášek byla na programu exkurse na agronomickou fakultu VŠZ v Praze 6 - Suchdole s prohlídkou rtg-spektrální laboratoře, vybavenou přístrojem VRA 2 a počítačem MINSK 22.

Na programu byly přednášky:

M. H i n t z , C. Zeiss, Jena, NDR: Spektroschemische Analysen mit dem vollautomatischen Röntgenfluoreszenz-Analysator VRA 2 des VEB C. Zeiss Jena.

Nach einer allgemeinen Einführung über die Anwendung der Röntgenfluoreszenzanalyse in Industrie und Forschung folgte eine Erläuterung der Vorbereitungsverfahren metallischer, pulverförmiger und flüssiger Proben für die qualitative und quantitative Analyse.

Anhand von Tabellen und Diapositiven wurde das analytische Leistungsvermögen des VRA 2 demonstriert.

Neben der Angabe der Nachweisgrenzen insbesondere der leichten Elemente in den verschiedensten Materialien folgten einige spezielle Anwendungsbereiche aus der Metallurgie, Glasanalyse und Salzindustrie, wobei besonders auf die erreichten hohen statistischen Genauigkeiten und die kurzen Messzeiten aufmerksam gemacht wurde.

U. J a k o b , C. Zeiss, Jena NDR: Konstruktive Merkmale des vollautomatischen Röntgenfluoreszenz-Analysators VRA 2

Es wurde über die apparativen Besonderheiten des VRA 2 berichtet. Der VRA 2, der damit erstmals in der ČSSR vorgestellt wurde, ist ein programmgesteuertes zweikanal - Röntgenspektrometer zur zerstörungsfreien qualitativen und quantitativen spektrochemischen Analyse aller Elemente mit Ordnungszahl

Z 11 (in besonderen Fällen auch Z = 9) möglich, das nach dem Abtastprinzip arbeitet und sich durch hohen Automatisierungsgrad und Bedienungskomfort sowie durch optimale und rasche Anpassungsfähigkeit auszeichnet.

M. R u p r y c h , VŠZ, Praha: Rentgenspektrální rozbor půd na automatickém rentgenové fluorescenčním spektrometru VRA 2 firmy VEB C. Zeiss, Jena.

V úvodu předneseného referátu byly uvedeny důvody, které vedly k řešení úkolu t. j. vypracování metody totálního chemického rozboru půd methodou R.F.S. (rentgenové fluorescenční spektroskopie).

Byla diskutována otázka získání přirozených standardů půd ČSSR a provedení jejich chemického rozboru, včetně zmínky metod, kterými byly stanoveny všechny makroelementy: SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , TiO_2 , CaO , MgO , K_2O , P_2O_5 , Na_2O , MnO . Tyto standardy připravil Výzkumný ústav rostlinné výroby - ČAZ, Ústav půdoznalecký, v Praze 6, Ruzyni.

Měření a vypracování metody pro stanovení výše uvedených kyslíčnicků bylo uskutečněno na aparatuře firmy VEB C. Zeiss, Jena NDR. Vollautomatischer Röntgenfluoreszenz Analysator VRA 2, univerzální sequenční dvoukanalový plně automatický rtg. fluorescenční analyzátor. Protože se u těchto vícesložkových vzorků projevily vliv matriového efektu a vzájemného ovlivňování i absorpce, bude třeba v další práci provést nutné matematické korekce získaných naměřených výsledků anebo přistoupit k řešení problému s užitím zředovací metody, respektive změny matrice analyzovaných vzorků s příměsí cellulosity a některého silného absorbentu, jakým je např. Bi_2O_3 .

Předběžně lze vyslovit předpoklad, že aparatura VRA 2 je velmi dobré zařízení k řešení všech analytických problémů v laboratořích, kde přichází v úvahu provádění analys s rozličným složením vzorků a různými analytickými úkoly. Jedno stanovení prvku včetně doby čerpání vakua trvá maximálně 2 minuty. Výsledky byly zpracovávány s užitím samočinného počítače MINSK 22.

V závěru bylo uvedeno, že přístroj VRA 2 firmy VEB C. Zeiss, je značným přínosem při řešení obtížných analytických úkolů a vyznačuje se potřebnou výkonností, reprodukovatelností a přesností, která znamená značný pokrok při řešení všech analytických problémů v metallurgii, strojírenství, chemického průmyslu, geologie a zejména v oboru zemědělských věd.

J. F i a l a , VÚRV, Ruzyně: Rentgenospektrální stanovení makroelementů v rostlinném materiálu na rtg. fluorescenčním analyzátoru VRA - 2.

Jako makroelementy vystupují v daném případě prvky N, P, K, Ca, Mg, S, Na, jejichž obsah v rostlinách je relativně vysoký a které mají význam v problematice rostlinné výroby. Dusík zatím nelze rtg.-spektrálně stanovit. Pro stanovení ostatních makroelementů byly během 1. čtvrtletí t. r. vypracovány metodiky a v současné době se provádějí komplexní analýzy ověřovacích rostlinných vzorků.

K vybuzení sekundárního charakt. záření se užívá chromové rentgenky s budícími parametry 40 kV, 49 mA pro všechny uvedené prvky. K izolaci jejich spektrálních linií slouží krystalky KAP (Na, Mg), PE (P, S) a LiF (K, Ca). Detektorem je ve všech případech proporcionální průtokový počítač. Při stanovení Na, Mg a P je nutno použít amplitudové analýzy a korigovat intenzity spektr. linií na jejich pozadí. S tím souvisejí poměrně dlouhé celkové doby měření, potřebné k dosažení dostatečně reprodukovatelných výsledků (u sodíku je to např. 460 sec).

Pokud jde o používaný systém rtg.-spektrální analýzy, jde v podstatě o jednorázové měření, přičemž se naměřené intenzity vztahují k intenzitě téže linie srovnávacího standardu, proměřovaného občas za shodných podmínek a obsahujícího všechny stanovované prvky ve vhodných koncentracích (tzv. korekce na vnější standard). Druhý kanál přístroje se využívá pouze k nepřímé předvolbě doby měření (předvolbou impulsů konstantní monitorové linie Cr - K₃, vybuzenou z kalibračního vzorku chromniklové oceli).

Ke kalibraci (k matematickému vyjádření závislosti poměrné intenzity spektrální linie na koncentraci uvaž. prvku) bylo použito přirozených rostlinných vzorků, standardisovaných přesní chemickou analýsou. Získané relace jsou uspokojivé - hodnoty korelačních koeficientů se pohybují v mezích 0,9840 (Na) - 0,9982 (P, S).

Pokud jde o výsledky dosud provedených ověřovacích analýz, lze je rovněž označit za uspokojivé. Rozdíly mezi chemickými a rtg.-spektrálními nálezy v převážném počtu případů nepřekračují 5 % chemického nálezu. Definitivní zhodnocení bude ovšem možno provést až po uskutečnění většího počtu ověřovacích analýz.

J. W a ň k o v á , VÚAnCh, Ústí n/l.: Rentgenospektrální stanovení mikroelementů v rostlinných materiálech.

Přednášející seznámila posluchače s nově vypracovanou rtg.-spektrální metodou stanovení Mn, Cu a Zn v různých druzích obilovin. Koncentrační oblast stanovovaných prvků je v rozsahu jednotek a desítek ppm. Dosažená přesnost metody u Mn a Cu činí $\sigma = 5$ % rel, u Zn $\sigma = 7$ % rel. Vypracovaná metoda vychází z původních materiálů bez jejich porušení (jen mletí a tabletace vzorku) a je universální pro všechny druhy obilovin, které přicházejí v agrochemické praxi k analýze.

Metoda byla vypracována na vakuovém rtg. spektrografu Philips PW 1540 jako podklad pro seriové analýzy na kvantometru VRA 2.

M. Š i s l e r o v á , VŠZ, Praha Suchdol: Provádění výpočtů pro rentgenospektrální analýzu na samočinném počítači MINSK 22.

V referátu byli posluchači seznámeni se způsobem, kterým jsou vyhodnocovány výsledky rentgenospektrální analýzy na VŠZ.

Jedná se o výpočty standardů metodou nejmenších čtverců a výpočty koncentrací vzorků pro běžné materiály, které jsou na VŠZ analysovány.

Z hlediska provozu u samočinného počítače bylo především třeba vytvořit přehledný a dostatečně obecný systém měření a

zápisu standardů i vzorků takový, aby jej bylo možno předávat výpočetnímu středisku bez zbytečných přepisů. Při výpočtu je kontrolována zároveň správnost zápisu i děrování.

Výsledky jsou ve formě tabulky, která v první části udává standardy a chybu v analytickém tvaru, ve druhé části tiskne počet impulsů, koncentraci a absolutní chybu pro každý prvek analyzovaných vzorků. Prvků může být ve vzorku nejvýše 10. Počet vzorků je neomezený.

Výpočet výše uvedených hodnot pro jeden prvek vzorku trvá asi 2 sec. Cena výpočtu je asi 1,40 Kčs. Do ceny se započítává ještě děrování a kontrola dat. Tato cenová kalkulace je předběžná.

Zájmová skupina instrumentálních radioanalytických method.

Skupina byla ustavena na 1. schůzce konané dne 1. června 1971 v Ústavu makromolekulární chemie ČSAV v Praze 6, Petřiny. Schůzku připravil a řídil Dr. M. V o b e c k ý z ÚJV v Řeži u Prahy, který byl rovněž zvolen předsedou této zájmové skupiny. Skupina by měla sdružovat pracovníky ze všech oblastí aplikace instrumentálních radioanalytických method; její působení neznamená dublování činnosti skupiny jaderné chemie Čs. chemické společnosti, v jejímž rámci se pěstuje i aktivační analýsa. Činnost obou organizací by se měla doplňovat (možnost pořádání i některých společných seminářů apod). Schůzky zájmové skupiny by se mohly konat na různých pracovištích zastoupených ve skupině, za účelem seznámení ostatních členů s metodikou, aparaturami a výsledky.

Bylo dohodnuto, že příští schůzka se bude konat asi v září v Ústavu nerostných surovin v Kutné Hoře.

Na program byl přednáška:

J. F r á n a , ÚJV ČSAV, Řež u Prahy: Spektrometrie záření gama s vysokým rozlišením.

V aktivační analýze se využívá vzniku radioaktivních izotopů prvků v jaderných reakcích. Jako jeden z nejvýhodnějších způsobů stanovení aktivity a tím určení obsahu prvků ve zkoumaném vzorku se ukazuje spektrometrie záření γ .

Vzhledem k tomu, že vzorek zpravidla obsahuje velké množství prvků, z nichž většina dává vznik izotopům s celou řadou přechodů γ , jsou zapotřebí spektrometry s vysokou rozlišovací schopností.

V současné době lze s Ge detektory vyráběnými v ČSSR dosáhnout rozlišení 2-3 keV v oboru energií do 2 MeV. Toto rozlišení spolu se zpracováním spekter na počítači umožňuje úplnou separaci alespoň jedné čáry ve spektru pro všechny prvky, přicházející v úvahu např. při aktivování neutrony v reaktoru, aniž by bylo nutné předem chemicky zpracovávat vzorek. Vzhledem k rozdílnému stupni aktivace jednotlivých prvků je tato metoda vhodná pro řadu stopových prvků.

Zájmová skupina elektronových mikroanalysátorů a stereomikroskopů.

Skupina se sešla dne 10.3.1971 na své 8. schůzce v ÚKDDS v Praze.

Byly předneseny tyto přednášky:

V. H u l í n s k ý , VŠChT, Praha: Korekce na mrtvou dobu detektoru rentgenového záření.

Typy detektorů rentgenového záření, proporcionální počítače, vliv mrtvé doby počítače na naměřený počet impulsů, závislost na intenzitě rentgenového záření. Jevy ovlivňující stárnutí počítače, změna mrtvé doby a rozlišovací schopnosti. Závislost výšky pulsu na intenzitě záření. Vliv elektronické aparatury na mrtvou dobu počítače. Metoda srovnávací, založená na měření intenzity rtg. čáry v závislosti na intenzitě absorbovaného proudu. Porovnání obou metod, způsob vyhodnocování měření.

K. J u r e k , VŠChT, Praha: Korekce na pozadí. Fyzikální jevy přispívající k měření intenzitě vybrané charakteristické čáry emisního rentgenového spektra. Šum elektronické aparatury, rozptyl elektronů a rtg. záření v komoře vzorku, spojitě rentgenové záření, kosmické záření. Vznik spojitě rentgenového záření. Měření pozadí bez diskriminace výšky pulsů a s diskriminací.

Zjišťování správné intenzity charakteristické emisní čary. Problémy související s měřeními velmi malých intenzit charakteristického záření. Ostatní rušivé vlivy (přístrojové, nevhodné prostředí) ovlivňující správnost měření.

V. J á n o š í k o v á , VŽKG, Ostrava: Princip a použití laserové mikroskopy fy Zeiss.

Možnosti použití pro analýzu kovů. Po celkovém všeobecném úvodu informovala o přesnosti analýs ocelí a různých dalších aplikacích.

Navazující přednáška J. S v o b o d y , AZNP Mladá Boleslav: Použití laserového mikroanalysátoru k analýze vměstků v hliníkových slitinách, kterou v jeho nepřítomnosti přednesl jeho spolupracovník, byla zaměřena především na praktické aplikace a problémy v AZNP Mladá Boleslav.

Obě přednášky vyprovokovaly živou diskusi, ve které si přítomní "elektronoví" a "laseroví" mikroanalytici vyměnili mnoho zkušeností. V závěru se pokusili přítomní sestavit informativní tabulku s nejdůležitějšími údaji:

mikroanalysátor	rok vzniku cca	počet přístř. V ČSSR	cena Kčs	analysovaný objem prům.	hloubka	anal. hmota g
Laserový	1962	cca 20	250 000	20-100	6-30	10^{-6} g
Elektro- nový	1950	11	3 mil	1-5	1-3	10^{-12} g

analys. prvky	přesnost analýsy cca	cena za 1 hod práce Kčs cca	obsluha osob
L jako opt. spektr.	0,2-0,5 %	50	1
E od atom. čísla	0,01-0,05 %	400	3

Dne 17.6.1971 se konala na VŠCHT 9. schůzka této zájmové skupiny. Na programu byla přednáška: K. J u r e k , VŠCHT, Praha: Korekce na atomové číslo - interakce elektronů s hmotou.

Přednáška podala přehled současného stavu poznatků o interakci rychlých elektronů s hmotou v souvislosti s kvantitativní rentgenovou mikroanalýzou. Stručně bylo charakterizováno brzdní elektronů ve hmotě, rozptyl elektronů, zákonitosti popisující vznik Röntgenova záření, ionizační průřezy atomů a jejich závislost na energii, hloubka vniku elektronů a porovnání teorie s experimenty. Byly probrány různé typy modelů, popisujících chování elektronů ve hmotě a vznik rtg. záření a ukázány jejich možnosti a omezení. Dále byly odvozeny různé metody výpočtu korekce na atomové číslo a zhodnocena vhodnost jejich použití v praxi.

Zprávy z komisí

Zpráva komise ČSSS pro výchovu a školství.

V dnešním čísle B u l l e t i n u bychom vás chtěli inoforovat o možnostech návštěvy přednášek, cvičení, seminářů a jiných forem výuky ve spektroskopických a v některých se spektroskopii souvisejících oborech.

Naše informace měla by vám pomoci při prohlubování vašich znalostí v určitém spektroskopickém oboru pro řešení vašich výzkumných úkolů.

Snažili jsme se podchytit alespoň ty nejzávažnější přednášky a podat vám je v přehledu ještě před začátkem školního roku (1971/72). Budeme však i nadále sledovat stávající a zjišťovat nové přednášky, které by vás mohly zajímat a budeme vás o nich průběžně informovat.

V přehledu uvádíme jen základní údaje a velmi stručný syllabus přednášek. Podrobné sylaby většiny přednášek máme k dispozici. Budete-li mít zájem o některou přednášku, můžete požádat o další informace nás nebo ještě lépe přímo autora, eventuelně katedru, pořádající danou přednášku.

Uvádíme jenom informace o přednáškách, které se nám podařilo získat, takže náš přehled je značně neúplný. Proto bychom vás chtěli poprosit o spolupráci, pokud sami víte či budete vědět o přednáškách postgraduálních kursech nebo jiných možnostech prohloubení vědomostí ze spektroskopických oborů - napiště nám - budeme ve zveřejňování informací pokračovat.

Doc. dr. ing. Zb. Ksandr Csc.
předseda komise pro výchovu
a školství

Matematicko-fyzikální fakulta Karlovy university, Praha

Dr. B. U r g o š í k , Katedra elektroniky a vakuové fyziky, Praha 2, Ke Karlovu 5, zimní sem. 0, letní 2 (IV), Úvod do hmotové spektrometrie: Typy analyzátorů (static. i dyn.), typy iont. zdrojů a fyzikální principy, funkce a iont. optika těchto zařízení.

Dr. B. S e d l á k CSc, Katedra fyziky pevných látek, Praha 2, Ke Karlovu 5, zimní sem. 0, letní 2 (IV), Radiospektroskopické metody ve fyzice pevných látek: Obecný úvod a jednotlivé metody (NMR, EPR, feromagnet. resonance, spinvlňová res., cyklotron. res. a pod.). Podán přehled závislosti jednotlivých typů spekter na mikrofyzikál. parametrech látek.

Ing. Z. C i h l a CSc, Katedra fyziky pro přírodovědné obory, Praha 2, Ke Karlovu 3, zimní sem. 2 (IV), letní 2 (IV), Molekulová spektroskopie: Přednáška zaměřena na teorii mol. spekter.

Ing. B. S c h n e i d e r DrSc, Dr. D. D o s k o č i l o v á CSc, Katedra fyziky pro přírodovědné obory, Praha 2, Ke Karlovu 3, zimní sem. 0, letní 7x2 hod. př., 7x1 hod. cvič. (IV, V), Experimentální metody chemické fyziky (v rámci př.: Metody mol. spektroskopie): Mol. pohyby, rotační spektra, vibr. spektra, NMR spektra a spektrometrie.

Dr. M. T o m á š e k CSc, Katedra fyziky pro přírodovědné obory, Praha 2, Ke Karlovu 3, zimní sem. 0, letní 4/2, Kvantová chemie s proseminářem: Přednáška není sice spektrálně zaměřena, z obecně teoret. hlediska může být užitečná. Bližší v syllabu.

Ing. K. P o l l á k , Katedra fyziky pro přírodovědné obory, Praha 2, Ke Karlovu 3, zimní sem. 2 (IV), letní 0, Základy teorie krystalového a ligandového pole: Principy teorií, krystalové pole, ligandové pole, aplikace na anorg. komplexy; výpočetní metody, souč. stav a perspektivy.

Doc. dr. K. V a c e k CSc, Dr. J. P a n t o f l í č e k , Katedra fyziky pro přírodovědné obory, Praha 2, Ke Karlovu 3, zimní sem. 0, letní 2 (IV, V), Vybrané kapitoly z luminescence: Spektroskopické studium zářivých a nezářivých přechodů v kondens. stavu.

Dr. J. P a n t o f l í č e k , Katedra fyziky pro přírodovědné obory, Praha 2, Ke Karlovu 3, zimní sem. 0, letní 2 (IV, V), Úvod do kvantové elektroniky.

Kromě uvedeného výběru přednášek resp. cvičení se na MFF KU koná řada přednášek obecného a naopak zase specializovaného charakteru z fyziky, které se spektroskopistů prostředně netýkají, mohou však pro ně být zajímavé a užitečné. Z oborů matematických je to řada přednášek z numerické matematiky, programování a statistiky. Bližší v seznamu přednášek fakulty pro každý jednotl. rok.

Přírodovědecká fakulta Karlovy university Praha

Prof. Dr. A. A. V l č e k DrSc, Doc. Dr. R. Z a h r a d n í k DrSc, Katedra fyz. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 1 (III), 2 (IV roč.), letní 2 (III), Chemická konstituce: Přednáška zahrnuje: Vlček - Teorie grup a chemické aplikace (cca 10 hod.), Zahradník - Elektronová, vibrační a rotační spektroskopie, radiofrekvenční oblast - NMR, ESR, NQR, zákl. teoret. úvod (celkem 10 hod.).

Doc. Dr. V. K a l o u s CSc, Katedra fyz. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 2 (IV), letní 0, Methody chem. výzkumu: V cyklu přednášek (třísemestr.) se tato část věnuje metodám, založeným na absorpci a emisi elmag. záření a hmotové spektrometrii - zaměření na přístroje a metodiku (celkem 20 - 22 hod.).

Doc. Dr. PhMr. M. M a l á t CSc, Dr. I. G á l v e z o v á , Dr. I. N ě m c o v á CSc, Doc. Dr. PhMr. V. S u k CSc, Katedra anal. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 0, letní 3 (IV), Optické metody v analytické chemii: Přednáška o různých spektrál. metodách v anal. chemii, např. emise v optické a rtg. oblasti, plamenová fotometrie, absorpce v různých oblastech luminiscenční analýza, NMR atd.

Dr. B. S t r a u c h CSc, Katedra anorg. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 0, letní 2 (III, IV), Molekulová spektroskopie v anorganické chemii: Symetrie a teorie grup v mol. spektroskopii, rotační, rotač. vibr. a vibrační spektra v IČ a Ramanově spektroskopii, aplikace na anorganické a koordinační slouče.

Dr. M. H o r á k CSc, Dr. J. K l i n o t CSc, Katedra org. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 2 (IV), letní 2 (IV), Spektrální metody v organické chemii: IČ a Ramanova spektroskopie (cca 20 hod.), UV - spektra (4 h.), optická rotační disperse a cirkul. dichroismus (2 h.), hmotová spektra (2 h.), NMR (cca 20 h.) se zaměřením na organickou chemii.

Dr. J. P o d l a h a CSc, Katedra anorg. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 0, letní 2 (IV), Elektronová spektroskopie anorg. sloučenin: Interpretace elektronových spekter anorg. sloučenin na základě teorie ligandového pole (nematematickým způsobem).

Dr. Z. D o l e j š e k CSc, Dr. Z. H e r m a n CSc, Katedra fyz. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 2⁺ + Přednáška obroční (příští v r. 1972), letní 0, Hmotová spektrometrie a srážkové jevy: Typy hmotových analyzátorů, ionizační procesy, aplikace metody hmotové spektrometrie v chemii a fyzice, monomolek. rozpady, teorie vzniku hmot. spekter, kinematika srážek mezi částicemi a dalš., kinematika chem. reakcí.

Dr. J. L o u b CSc, Dr. B. S t r a u c h CSc, Katedra anorg. chemie, Praha 2, Albertov 2030, zimní sem. 25-30 hodin turnus (jen spektrál. část), letní 0, Praktikum z molekulové a krystalové struktury: Technika měření, vyhodnocování a interpretace IČ a Ramanových spekter vybraných anorg. sloučenin, studovaných v návaznosti rtg. metodami. Pracovní skupiny dvoučlenné.

Dr. P. K a š p a r , Katedra mineralogie, Praha 2, Albertov 6, zimní sem. 0, letní 16 h. celkem na spektrál. metody (pro II. roč.), Methody laborator. výzkumu minerálů: Část přednášky a cvičení věnovány emisní spektr. analýze minerálů (1/3 teorie, 2/3 prakt. cvičení).

Dr. P. K a š p a r , Katedra mineralogie, Praha 2, Albertov 6, zimní sem. 2 (IV, V) letní 0, Proměřování optických spekter pro pokročilé: Zaměření na mineralog. problémy.

Vysoká škola chemicko-technologická - fakulta chemické technologie, Praha

Doc. Ing. Dr. B. P o l e j CSc, Katedra analytické chemie, VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 2 (DP), letní 2 (DP), Spektrální analýza v oboru atomových optických spekter: Charakteristika předmětu jako optické metody. Přístroje pro emisní spektrální analýsu. Elektronová spektra atomů. Teorie plasmat a buzení spekter. Základní údaje o kvantových přechodech. Kvalitativní analýza. Kvantitativní analýza.

Doc. Ing. Dr. M. H e j t m á n e k CSc, V. S y c h - r a , prom. chemik CSc, Katedra analytické chemie, VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 0, letní 2 (DP), Plamenové metody v analytické chemii. (Atomová, emisní, absorpční a fluorescenční spektrofotometrie): Základy teorie optických elektronových spekter. Základní principy atomové emisní, absorpční a fluorescenční spektrofotometrie. Plamen jako zdroj záření. Základní aspekty týkající se rozkladu, atomisace a excitace vzorku v plameni. Instrumentální stránka plamenových metod. Analytické možnosti jednotlivých plamenových metod. Příklady použití jednotlivých plamenových metod v praxi.

Ing. M. K r á l CSc, Katedra analytické chemie, VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 2 (DP), letní 0, Elektronová spektra anorganických sloučenin: Úvod - hmota záření. Jednoatomové chromofory. Teorie grup. Teorie krystalového pole. Výběrová pravidla. Víceatomové chromofory. Electron-transfer spektra. Optická aktivita sloučenin.

Doc. Ing. Dr. Zb. K s a n d r CSc, Katedra analytické chemie, VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 0, letní 2/2 (DP), Metody molekulární spektroskopie: Elektromagnetické spektrum. Fyzikální výklad infračerveného spektra. Interpretace infračervených spekter. Aplikace infračervené spektroskopie v chemii. Přístrojová stránka infračervené spektroskopie. Fyzikální výklad metod radiofrekvenční spektroskopie. Interpretace radiofrekvenčních spekter. Praktické aplikace radiofrekvenčních spekter. Praktické aplikace radiospektroskopie v chemii. Přístrojová stránka metod radiofrekvenční spektroskopie.

Ing. B. S c h n e i d e r DrSc, Katedra fyzikální chemie, VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 2/1 (VII), 2/1 (IX), letní 2/1 (VIII), Struktura atomů a molekul: Matematický aparát chemické fyziky, Klasická mechanika soustavy částic. Kvantová mechanika. Struktura molekul a spektra rotační, vibrační a jaderná. Teorie chemické vazby. Elektronická spektra molekul. Difrakce X paprsků a elektronů.

Doc. Ing. J. K u t h a n CSc, Katedra organické chemie, VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 2 (VII), letní 2/2 (VIII), Fyzikální metody organické chemie: Aplikace fyzikálních metod na řešení struktur organických molekul. Jsou zahrnuty převážně metody spektroskopické (UV, V, IČ, NMR, HS), některé elektro-metrické (polarografie, dielektrimetrie) a některé metody kvantové chemie (Hückel).

Ing. V. Ř i h á k , Výpočtové středisko VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 1/1 (III), letní 1/1 (IV), Základy programování: Prostředky pro numerické počítání. Princip činnosti samočinného počítače. Základní části samočinného počítače. Oblasti využití počítačů. Základní schema postupu zpracování úlohy. Základní prvky jazyka FORTRAN. Programování v jazyce FORTRAN.

Doc. Ing. Dr. B. P o l e j CSc, Katedra analytické chemie, VŠCHT Praha 6, Technická 5, zimní sem. 3/1 (IX), letní 0, Instrumentální analýza (optické metody): Základy téměř všech optických metod, přístrojová stránka a aplikační možnosti jednotlivých metod.

ČVUT- Praha, elektrotechnická fakulta

Ing. F. H a n i t z , Katedra fyziky FEL, Praha 6, Technická 2, 2 hod. zimní a letní semestr, Teoretická fyzika: Přednáška je určena pro posluchače třetího ročníku silnoproudého směru. Obsahuje základní partie z analytické mechaniky, teorie relativity, kvantové mechaniky a statistické fyziky. Tyto partie jsou s ohledem na posluchače podány jednoduše a srozumitelně, takže mohou být vhodným začátkem pro soustavnější studium těchto oborů. Současně s touto přednáškou probíhá paralelně obdobná přednáška pro slaboproudý směr, která je však zaměřena poněkud hlouběji a přednáška pro dálkové studium.

Ing. J. L e g o CSc, Katedra fyziky FEL, Praha 6, Technická 2, 4 hod. zimní semestr, Obecná fyzika III: Přednáška je určena pro posluchače silnoproudého směru elektrotechnické fakulty, kterým má dát základní informaci o jednotlivých oblastech fyziky. Proto jsou zde zařazeny partie z elektromagnetické teorie světla, fyzikální a geometrické optiky a fyziky elektronového obalu atomu. Rovněž jsou probírány základy elektrických výbojů v plynech a záření absolutně černého tělesa. Obdobná přednáška probíhá paralelně i pro směr slaboproudý.

Dr. A. P e r j é s s y , ing. M. L i v a ř , Dr. E. S o l č a n y o v á , Katedra organické chemie PF UK Bratislava, Šmeralova ul. zimní sem. 0, letní 2/2 (VIII), Riešenie štruktúry organických zlúčenin pomocou spektrálnych metod: IČ - Integrované intenzity absorpčných pásov. Štúdium konformácií, štúdium tautomerných rovnováh, štúdium vodíkových väzieb a štúdium reaktivity organických zlúčenin. UV - základný kurz, aplikácia na kinetické merania, merania rovnovážných konštánt. NMR - základný kurz.

Dr. A. P e r j é s s y , Katedra organickej chémie PF UK Bratislava, Šmeralova ul., zimní sem. jednotlivé úlohy (IV), letní 0, Metódy chemického výzkumu. (IČ-spektrometria) (cvičenie): Praktické merania na UR - 20 a interpretácia spektier.

M. D o b i a š , prom. chemik, Katedra jadrovej chémie, PF UK Bratislava, Šmeralova ul., zimní sem. 0, letní 2 (DP), Hmotnostná spektrometria: Fyzikálny princíp hmotnostnej spektrometrie. Použitie pre izotopickú analýzu. Hmotnostné spektrá organických látok. Fragmentácia iónov. Potenciály vzniku iónov. Vyhodnocovania spektier.

Dr. L. Ž ú r k o v á CSc, Katedra anorganickej chémie, PF UK Bratislava, Šmeralova ul., zimní sem. 2/- (VII), letní -/5 (VIII) (cvičenia vedie ing. L. Ulická), RTG - štruktúrná analýza: teória. Kryštalografické formy. Teória difrakcie. Teoretické princípy používaných metód. Metódy práškovej. Metódy mokrých látok. Weissenbergova rotačná, precesná Laneho.

Doc. ing. E. P l š k o DrSc, Katedra analytickej chémie, PF UK Bratislava, Šmeralova ul., zimní sem. 2 (VII), letní 0, Optické metódy analýzy. Zhruba podľa knihy: E. Plško DrSc: Praktické základy optických metód v chémii. RTG - fluorescencia.

Doc. ing. E. P l š k o DrSc, Katedra geochemie, PF UK Bratislava, Šmeralova ul., zimní sem. 1/3 sem/7 (III), letní 0, Laboratorné metódy výzkumu minerálov: Emisná spektrochem. analýza. Spektrofotometria. Atómová absorpcia. RTG - fluorescencia. IČ - spektroskopia.

Slovenská vysoká škola technická - elektrochemická fakulta SVŠT

Prof. Dr. J. G a r a j , Katedra fyziky (strojnická fakulta) SVŠT Bratislava, Gottwaldovo nám., zimní sem. 0, letní 2/1 (VIII), Technická optika a optické prístroje: Refraktometria. Interferometria. Spektrálne optické prístroje. Pomocné prostriedky pre fotometrické a kolorimetrické metódy. Niektoré typy fotometrov. Mikroskopy.

Prof. Dr. J. G a r a j , Katedra fyziky (strojnická fakulta) SVŠT Bratislava, Gottwaldovo nám., zimní sem. 4/2 (IX), letní 0, Technická optika a optické prístroje: Specializácia (obor) - stavba prístrojovej, regulačnej a automatizačnej techniky.

Ing. J. Š t e f a n e c CSc, Katedra analytickej chémie, CHTF - SVŠT Bratislava, Jánská 1, zimní sem. 5/9 (IX), letní 0, Optické metódy: Úvod do optických analytických metód. Emisná spektrálna analýza. Plamenová fotometrie. Atómová absorpčná spektrofotometria. Absorpčná spektrálna analýza v UV a viditeľnej oblasti. Fluorescenčná analýza. Infračervená spektrometria. Mikrovlnná spektrometria. Ramanova spektroskópia. Metódy magnetickej rezonančnej spektroskópie. Použitie rtg lúčov a elektrónov v analytickej chémii. Hmotnostná spektrometria.

Doc. ing. Dr. Š. K o v á č CSc, Katedra organickej chémie SVŠT Bratislava, Jánská 1, zimní sem. 3/5 (VII), letní 0, Spektrálne metódy v organickej chémii: Infračervená spektroskópia. Ramanova spektroskópia. Hmotnostná spektrometria. Kombinovaná aplikácia - IČ, UV, Via, R, NMR a H spektroskópia v organickej chémii.

Prof. ing. dr. A. T k á č DrSc, Katedra fyzikálnej chémie CHTF-SVŠT Bratislava, Jánská 1, zimní sem. 4/10 (IX), letní 0, Chemická fyzika II. (Experimentálna technika a interpretácia spektier): Obecné zákony platné pre celé elmag. spektrum. Spektroskopické metódy. Rotačné spektrá a mikrovlnná spektroskópia. Vibračná spektroskópia. Rotačno-vibračné spektrá. Ramanové spektrá. Elektronové spektrá. Elektronové spektrá molekúl. Blesková fotolýza. FPR - spektroskópia. NMR - spektroskópia. Lassery. Hmotnostná spektroskópia. Mössbauerova spektroskópia. Kombinované spektroskopické metódy a interpretácia štruktúry. Pomocné experimentálne metódy chemickej fyziky.

Universita P. J. Šafaříčka v Košiciach

Prof. ing. M. R á k o š DrSc, Přírodovědecká fakulta,
Universita PJŠ v Košiciach (Katedra fyziky - Vysoká škola
technická, Elektrochemická fakulta Košice, Komenského park 2),
Rádiospektrscópia.

Zprávy komise ČSSS pro přístroje.

Ústav přístrojové techniky ČSAV Brno vyřešil dva zajímavé přístroje laserové techniky, jejichž výrobu převzala firma METRA Blansko.

Jednofrekvenční He-Ne laser je stabilní jednofrekvenční plynový laser s vysokou časovou a prostorovou koherencí. Vyzářuje na jediném kmitovém modu vlnové délky 6329, 9141 Å ve vakuu.

Zařízení se skládá z optického rezonátu, který je tvořen dielektrickými zrcadly a z křemenné trubice s aktivním médiem (směs He^3 a Ne^{20}). Pomocí proudově stabilizovaného zdroje vysokého napětí se v trubici vytváří výboj, který vybudí atomy aktivního plynu na vyšší energetické hladiny. Vznik inverze v obsazení hladin je prvním předpokladem pro funkci laserového oscilátoru. Elektromagnetické pole působící uvnitř optického rezonátu stimuluje přechody dalších a dalších atomů. Výsledkem je, že se v rezonátoru ustálí intenzita záření, jehož část vychází polopropustným zrcadlem jako výstupní paprsek laseru. Medium výboje v plynu v laserové trubici můžeme tedy považovat za zesilovač optického záření.

Konfigurace rezonátu zajišťuje činnost laseru na jednom modu (podélném i příčném). Invarový rezonátor s dielektrickými zrcadly je uložen v termostatu. Stabilita kmitočtu na střed Dopplerovy linie izotopu Ne^{20} je udržována servosystémem, který řídí délku rezonátoru elektrostaticky piezokeramickým kroužkem, na němž je uchyceno jedno zrcadlo. Stabilita kmitočtu dosahuje hodnoty $2 \cdot 10^{-9}/8$ hodin. Jednofrekvenční laser pracuje se zaručenou hodnotou vlnové délky vzhledem ke světovému normálu ^{86}Kr s přesností $\pm 3 \cdot 10^{-8}/1000$ hodin.

Jednofrekvenční He-Ne laser je určen pro měření dráhových rozdílů, interferometrii, metrologii a pro optickou heterodynní detekci. - Je základním měřicím zařízením pro měření frekvenčních vlastností laserů.

TECHNICKÉ ÚDAJE:

Vlnová délka	6329, 9141 Å ve vakuu
Přesnost kmitočtu	$2 \cdot 10^{-9}/8$ hod.
Výkon	200/ W
Přesnost vlnové délky vzhledem ke světovému normálu:	$\pm 3 \cdot 10^{-8}$ /dlouhodobě, cca 1000 hod.
Průměr modu	0,5 mm (průměr lze zvětšit pomocí teleskopu)
Rozbíhavost svazku	cca 10 miliradianu (rozbíhavost lze zmenšit asi 20 x pomocí kolimač. teleskopu)
Rozměry hlavice	100 x 170 x 300 mm
Rozměry elektronické napájecí, stabilizační a měřicí jednotky	480 x 200 x 400 mm

Laserinterferometr je sestaven z jednofrekvenčního laseru a interferometru. Umožňuje připojení elektronických obvodů pro počítání, násobení patřičným zlomkem vlnové délky a číslicové vyjádření měřené délky.

Z malé šířky spektrální linie a dobré frekvenční stability koherentního záření jednofrekvenčního laseru vyplývá velká koherenční vzdálenost tohoto zdroje světla. Těchto vlastností lze velmi dobře využít pro interferenční měření délek. Význam této metody zdůraznila též nová mezinárodní definice jednotky délky stanovená na základě vlnové délky světla výbojky ^{86}Kr . Z hodnoty stability kmitočtu vyplývá, že pomocí laserového interferometru je za vhodných podmínek možno měřit délky s přesností řádu 10^{-8} . Za atmosférických podmínek je přesnost omezena změnami indexu lomu atmosféry. Přesnost při normálních laboratorních podmínkách dosahuje hodnot 10^{-6} do 10^{-7} .

Uspořádání hranolové optiky eliminuje teplotní změny vlastního interferometru. Hranolový interferometr je možno upevnit přímo na hlavici laseru. Koutový odrazeč lze umístit na pohybu-

jící se části, jejíž souřadnici měříme. Interferometr má ve-
stavěné polovodičové detektory a zesilovače pro snímání inter-
ferenčních proužků. Na výstupu vznikají dvě napětí obdélníko-
vého tvaru fázově posunuta o 90° , určující směr.

Laserový interferometr poskytuje možnost měření délek v
širokém rozsahu a s extrémní přesností. Laserové techniky je
možno s výhodou použít ve strjírenském průmyslu při konečných
operacích výroby a kontroly a také pro číslicové řízení speciá-
lních strojů. Využití laserové techniky se jeví výhodným rovněž
v dalších oborech výzkumu a průmyslové výroby, např. pro přes-
ná měření rychlosti, zrychlení a úhlů, dále při měření a nast-
vování v oblasti mikroelektroniky, kde přinese nové aplikační
možnosti.

TECHNICKÉ ÚDAJE:

Měřená vzdálenost	0-10 m (případně i více)
Rozlišení interferometru	$\frac{\lambda}{4}$
Přesnost měření	$\pm 1.10^{-6}$ v atmosféře, při užití korekcí
Max. rychlost posuvu	10 cm/sec
Průměr svazku	6 mm
Výstup. napětí zesilovačů de- tekce proužků:	
pro logickou nulu	menší než 0,4 V
pro logickou jedničku	3 V
Výstupní impedance zesilovačů detekce proužků	1 k Ω
Rozměry interferometru	\emptyset 90 x 90 mm
Rozměry koutového odražeče	70 x 50 mm
Rozměry hlavice laseru	100 x 170 x 300 mm

MOLEKULOVÁ SEKCE

Dne 3. června 1971 se konala v Závodním klubu ministers-
tva stavebnictví v Praze 2, Na poříčním právu 1, 11. pracovní
schůze sekce molekulové spektroskopie ČSSS. Na této schůzi by-
la kromě odborné části i diskuse o zaměření nové utvářené záj-
mové skupiny molekulové spektroskopie s vysokým rozlišením a
stimulované emise.

Schůzi připravil a řídil dr. M. Horák.

Na programu byly dále přednášky:

V. Č e r m á k , Ústav fyzikální chemie ČSAV, Praha:

Fotoelektronová spektroskopie

Přednáška byla stručným přehledem nových spektroskopických
metod, založených na měření rozdělení elektronů uvolněných při
ionisaci molekul a to:

1. Fotony o energii desítek elektronvoltů (fotoelektronová spek-
troskopie).
2. Fotony o energii řádu tisíců elektronvoltů (ESCA, Electron
Spectroscopy for Chemical Analysis).
3. Vzbuzenými částicemi v metastabilním stavu o energii do 20
elektronvoltů (Penningova ionizační spektroskopie).

R. S o v i ě k a , Ústav fyzikální chemie ČSAV, Praha:
Infračervený spektrometr s velmi vysokým rozlišením

V letech 1963 - 1970 byl v Ústavu fyzikální chemie ČSAV navržen a zhotoven infračervený vakuový spektrometr, pracující v oblasti od 8000 - 400 cm^{-1} . V zadání tohoto úkolu bylo dosaženo rozlišení 0,0,4 cm^{-1} v blízké infračervené oblasti. Úkol byl zdárně vyřešen díky dobré spolupráci s četnými průmyslovými závody (více než 20) a výzkumnými ústavu v ČSSR i v zahraničí, počátkem t. r. byla změřena první infračervená spektra.

Při řešení úkolu byly navrženy a vyrobeny unikátní celky, především otočné zařízení ohybové mřížky, poháněcí polohové servosystémy a náročná optická zařízení (včetně velkopřůměrových zrcadel). Spektrometr je osazen vysoce kvalitní difrakční mřížkou o rozměrech 25 x 14,5 cm s počtem 73,25 vrypů na mm; přístroj je vybaven sadou detektorů a vysoce kvalitní zesilovací elektronikou.

Při měření bylo dosaženo požadovaných parametrů přičemž frekvence byly stanoveny s přesností 0.002 cm^{-1} .

Na 11. pracovní schůzi molekulové sekce byla dne 3. června ustavena, Zájmová skupina pro molekulovou spektroskopii s vysokým rozlišením a stimulovanou emisí, jejímž vedoucím byl zvolen Doc. dr. D. P a p o u š e k , Ústav fyzikální chemie ČSAV, Máchova 7, Praha 2.

Zájmová skupina sdružuje pracovníky z oboru teorie a experimentálních metod infračervené spektroskopie s vysokým rozlišením, mikrovlonné rotační rezonanční spektroskopie, jaderné magnetické resonance a molekulových laserů. Formou přednášek a exkursí na jednotlivá pracoviště bude skupina informovat zájemce o práci v uvedených oborech na našich ústavech, o perspektivních nových směrech výzkumu a bude se snažit podněcovat mezioborovou spolupráci. Počítá se předběžně i se spoluprací skupiny na organizaci mezinárodních seminářů o infračervené spektroskopii s vysokým rozlišením v Praze (příští v roce 1972).

Pouze pro vnitřní potřebu. Vydává Československá spektroskopická společnost při ČSAV se sídlem ve Výzkumném ústavu ČKD, v Praze 9, Na Harfě 7. Za ČSSS zodpovídá Dr. B. Moldan CSc. Redakce Ing. F. Valeška. Redakční uzávěrka dne 15. července 1971.

Vytiskla Státní tiskárna, n. p., závod 5, Praha 8, Tř. Rudé armády 171.

ACADEMIA - MTS - IT 0194 - 1971