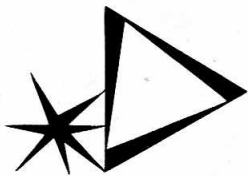


~~ING. IVO ŠLĀR~~



Československá spektroskopická společnost

# Bulletin

Čs. spektroskopická spol.  
Č. 42  
1984

B u l l e t i n

Číslo 42

červen 1984

Z obsahu 42.čísla Bulletinu Čs. spektroskopické společnosti

	str.
Zprávy ze Společnosti	
- 37. schůze hlavního výboru	3
- rámcový plán odborné činnosti na rok 1985	4
Sekce optické atomové spektroskopie	6
Sekce molekulové spektroskopie	9
Sekce speciálních spektroskopických metod	15
Komise	
- přístrojová komise : fond firemní literatury	18
Soutěž mladých spektroskopiků 1983	19

## ÚVODEM

Ošidná bývají neuvážená předsevzetí. Tímto konstatačním nemínil redakce Bulletinu otevřít tribunu manželské poradny, ale přiznat, že její novoroční předsevzetí zaktualizovat vydávání Bulletinu, aby jednotlivá čísla nepřipomínala spektroskopické letopisy, bylo též předsevzetím klamným. A tak se redakce dovolává pochopení laskavého čtenáře (a je si jista, že všichni čtenáři jsou laskaví), že přes veškeré úsilí vychází prvé číslo ročníku 1984 až s červnovým datem. To proto, že dodané rukopisy ležely pod kompaktní krustou šálků od kávy, popelníčků a krabiček od analgetik, jakožto pracovních nástrojů v době přípravy 7.čs.spektroskopické konference, a navíc seismická narušení sekretariátu Společnosti v předkonferenčním období znamenitě postihla i redakci, jež byla mobilizována k asanačním pracem při častých termínových požárech. Snad tolik na vysvětlenou.

Těm čtenářům, kteří nám pak zůstanou věrní, můžeme prozradit, že příští číslo Bulletinu bude monotematicky zaměřené na referenční materiály a jejich náležitě využití, aby si i oni mohli pro zlepšení své analytické práce učinit dobrá předsevzetí...

za redakci Bulletinu  
M.Para

## Zprávy ze Společnosti

Dne 23.května 1984 se na fakultě strojního inženýrství ČVUT konala 37.schůze hlavního výboru Čs.spektroskopické společnosti. Schůzi zahájil a řídil předseda Společnosti Dr.Jan Mráz.

Úvodem Dr.Špačková přednesla zprávu o činnosti předsednictva za uplynulé období, během kterého se předsednictvo sešlo celkem 7x. Předmětem jednání předsednictva bylo především zabezpečení 7.čs.spektroskopické konference a VIII.CANAS. Dále Dr.Špačková informovala o založení společné desetičlenné komise s Chemickou společností pro zajištění dalšího rozvoje spektrálně analytických metod v ČSSR.

O stavu příprav konference dále podrobně informovali Dr.Sychra a Ing.Šlár. Uvedli, že do odborného programu je zařazeno 73 vyzvaných přednášek, 261 posterů, 8 přednášek zástupců firem (ve zvláštní sekci) a že účast potvrdilo 9 zahraničních firem a 5 výrobců referenčních materiálů z ČSSR.

Ing.Šlár podal souhrnnou zprávu o činnosti komisi. Doc.Papoušek informoval o státním plánu základního výzkumu v oboru spektroskopie a upozornil, že v něm není zastoupena atomová spektroskopie.

Dr.Sychra seznámil členy hlavního výboru s plánem odborné činnosti na rok 1985 (plán uvádíme dále v tomto čísle Bulletinu). O možnosti uspořádat tematický zájezd na XXIV.CSI v roce 1985 informoval Doc.Ksandr; prozatím se uvažuje o spolupráci s VTS o.p.Škoda Plzeň.

Ve slavnostní části schůze předal ceny vítězům soutěže mladých spektroskopiků za rok 1983 Dr.Mráz.

Rámcový plán odborné činnosti na rok 1985

SEKCE OPTICKÉ ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE

Konference Prekolokvium (předcházející 24.CSI v GaPa)  
Téma : Optimalizace a vyhodnocování spektrochemických analytických metod  
(Zemplínská Šírava, září, 5 dnů)

OS atomové absorpční a plamenové spektroskopie

9. pracovní seminář na téma "Využití AAS ve výzkumu a výrobě"  
(Kružberk, duben, 3 dny)

OS spektroskopie nevodivých materiálů

skupina se bude podílet na přípravě Prekolokvia

OS automatické spektrometrie v hutnictví

11. kurz automatické spektrometrie pro začátečníky (Dům techniky ČSVTS Ostrava, I. čtvrtletí)
- Seminář "Nové metody v emisní optické spektrometrii" (Dům techniky ČSVTS Ostrava, II. čtvrtletí)
- Schůze na téma : Kalibrace a recalibrace automatických spektrometrů (Praha, IV. čtvrtletí)

OS laserové mikroanalýzy

- Seminář "Nové metody v emisní optické spektrometrii" (Dům techniky ČSVTS Ostrava, II. čtvrtletí)
- Schůze na téma : Odborný servis a údržba laserového mikroanalysátoru LMA-10 a LMA-1. (místo a datum dosud neurčeno)

OS spektroskopie kovů

Seminář "Nové metody v emisní optické spektrometrii"  
(Dům techniky ČSVTS Ostrava, II. čtvrtletí)

SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE

OS vibrační spektroskopie

- Kurz vibrační spektroskopie (Praha, I. čtvrtletí, 5 dnů)
- seminář - téma neurčeno (Praha, květen)
- seminář - téma neurčeno (Praha, říjen)

OS magnetické rezonanční spektroskopie

- XII. EPR seminář (Pezinská Baba, květen)
- mezinárodní NMR symposium (SVŠT Bratislava, ÚOCHB ČSAV Praha) (Smolenice, červen)
- letní škola NMR pro pokročilé (Brno, srpen, 5 dnů)
- XIII. NMR seminář (Brno, listopad)

OS spektroskopie pevného stavu

- seminář - 1 den, 2 přednášky, (Praha)
- seminář - 1 den, téma : Spektroskopický experiment řízený počítačem (Praha)
- seminář - 1 den, soubor referátů (Praha)

OS elektronové spektroskopie a fotochemie

Seminář na téma : Lasery ve spektroskopii a fotochemii  
(Praha, II. čtvrtletí, 2 dny)

OS spektroskopie vysokého rozlišení

v rámci semináře OS vibrační spektroskopie budou předneseny přednášky o nových spektroskopických metodách Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopy a diferenční-frekvenční laserové spektroskopii

SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

OS lokální elektronové mikroanalýzy

Seminář na téma : Počítačové řízení procesů mikroanalýzy VDS a EDS. Společně s firmou Tracor Europe a Službou výzkumu (Praha, září, 2 dny)

OS elektronové a iontové spektroskopie

Seminář na téma : Elektronová a iontová spektroskopie a příbuzné metody ve výzkumu povrchových procesů (květen, 3 dny, místo neurčeno)

OS hmotnostní spektrometrie

- schůze - 1 den, Praha, duben
- Tematický zájezd na 10. mezinárodní hmotnostně spektrometrickou konferenci
- schůze - 1 den, Praha, říjen

OS instrumentálních radioanalytických metod

- Konference IAA 85 (květen, 5 dnů, Klučnice)
- Schůze na téma : Radioanalytické metody (říjen, Praha)

OS Mössbauerovy spektroskopie

Seminář na téma : Zaměření Mössbauerovy spektroskopie v 8. pětiletce (Bratislava, květen, 2 dny)

OS rentgenové spektrometrie

- schůze na téma : Jednoúčelové rtg spektrální analyzátory s radionuklidovým buzením v průmyslové aplikaci (Nové Strašecí, duben, 1 den)
- schůze na téma : Matematické metody v RFA (říjen, 1 den, místo neurčeno)

Komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí

seminář - téma neurčeno (květen, 5 dnů, Klučnice)

## SEKCE OPTICKÉ ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE

Odborná skupina automatické spektrometrie v hutnictví

### 10.celostátní kurz Automatická spektroskopie pro začátečníky

se uskutečnil v Domě techniky ČSVTS v Ostravě ve dnech 27.2.-2.3.1984. Vedle řady přednášek teoretických i zaměřených na jednotlivé typy spektrometrů proběhla také praktická cvičení v kvantometrických stanicích Třineckých železáren, Vítkovic a Nové hutě v Ostravě. Kurzu se zúčastnilo celkem 46 pracovníků z hutních závodů, cementáren a dalších odvětví průmyslu i výzkumu, kteří v závěrečné besedě navrhli některá zlepšení podobného kurzu v příštím období (např. rozdělit kurz na dva jednotýdenní kurzy pro optickou emisní spektrometrii a rtg-fluorescenční spektrometrii, věnovat více času praktickým cvičením, programování a metodám vyhodnocování, doplnit téze kurzu vydané Domem techniky o příklady řešení kalibrace, programování a vyhodnocování). Vedení OS automatické spektrometrie v hutnictví pokládá tento kurz za perspektivní i v příštích letech vzhledem k trvalému zájmu z řad uživatelů přístrojů.

### Symposium Hilger analytical Rank Precision Industries

se uskutečnilo v Ústí nad Labem ve dnech 11. a 12.4.1984 (hlavním pořadatelem byl DT ČSVTS Brno) a bylo zaměřeno na přístrojovou techniku firmy v oblasti automatických spektrometrů řízených mikroprocesorovou technikou, analyzátorů plynů, uhlíku a síry v kovech a v oblasti přetavovacích pecí pro kovy i oxidické materiály. Přednášky zahraničních odborníků byly doplněny přednáškami našich pracovníků o praktických zkušenostech s provozem některých přístrojů a také exkurzí do vybraných laboratoří (Kovohutě Děčín - Polyvac E 962, Kovohutě Povrly - Polyvac E 1000 s doutnavým výbojem, Kovošrot Ústí n.L. - mobilní spektrometr fy Spectro-Spectrotest I). Symposia se zúčastnilo přibližně 120 zájemců.

14.pracovní schůze odborné skupiny automatické spektrometrie v hutnictví na téma : Servis automatických spektrometrů s účastí 55 odborníků se konala ve dnech 5. a 6.6.1984 ve VZÚ NHKG Ostrava.

Dále uvádíme stručná resumé přednášek.

Bohuslav P o l j a k , NHKG Ostrava : 25 let VZÚ NHKG

V přednášce byly uvedeny informace o vývoji VZÚ NHKG, jeho úkolech a rozdělení na jednotlivá oddělení. Podrobně byl uveden význam automatických spektrometrů pro NHKG Ostrava, na kterých se provádí více než 80 % všech stanovení. Byl rovněž zdůrazněn význam servisu a hlavně pravidelných prohlídek.

Tomáš H o l e k , NHKG Ostrava : Servis automatických spektrometrů POLYVAC E 970 a E 1000 fy Hilger Analytical

V přednášce byly popsány principy jednotlivých spektrálních zdrojů FS 273, FS 163, SY 169, konstrukce spektrometrů přístrojů POLYVAC E 970 a E 1000 a principy hardware mikroprocesorového systému A 400. Dále byly poskytnuty informace o programovém vybavení mikroprocesorového systému A 400 a navazujících systémů pro zpracování dat PDM 1 a Dataspek I až IV. Byly rovněž uvedeny zkušenosti s provozem, poruchovost a systém pravidelných prohlídek, Využitelnost přístrojů Polyvac je vyšší než 99,0 % ve čtyřsměnném provozu.

Petr K o ž d o ň , Třinecké železářny VŘSR, Třinec : Servis automatických emisních přístrojů fy ARL (Baush and Lomb.)

V přednášce byl uveden výrobní program fy ARL v oblasti emisních spektrometrů. Jedná se o typy 3520, 3560, 3580, 3510 a mobilní spektrometr typ 3600.

Byly popsány jednotlivé spektrometry, mikroprocesorové systémy, hardware i software jednotlivých přístrojů. Pro řízení spektrometrů a vyhodnocování používá fy ARL číslicových mikroprocesorů fy DEC a to DPC 11/82/64 (Falcon) a DPC 11/84/64 s vnějšími paměťmi. Standardní programy SAS - 11, SAS/DPS - 11. Mobilní spektrometr je vybaven počítačem HP 9915.

V závěru přednášky byly uvedeny zkušenosti se servisem, systém pravidelných prohlídek a poruchovost. Byly uvedeny informace týkající se práce servisního střediska fy ARL v TŽ Třinec.

Ludvík Š v a r d a l a , VZÚ NHKG, Ostrava : Mobilní spektrometry Spektrotest

V přednášce byly popsány jednotlivé přístroje Spektrotest S, C a L, jejich zdroje pracující standardně s podmínkami stejnosměrného oblouku o třech intenzitách a jejich spektrometry, pracující v oblasti 170 - 530 nm.

Byla popsána elektrická část přístroje - mikroprocesorový systém na bázi použití mikroprocesoru MOTOROLA 6802. Byly popsány jednotlivé dialogy pro program kontroly záměny, analytický, textový a kvality.

Byly uvedeny zkušenosti se zaváděním, obsluhou a servisem.

Závěrem přednášky byly uvedeny podrobnosti systému práce servisního střediska ve VZÚ NHKG, které zajišťuje servis spektrometrů fy Hilger a Spektro.

Petr K o l e č k á ř, VZÚ NHKG, Ostrava : Přístroje pro rtg fluorescenční analýzu fy ARL

V přednášce byly podrobně popsány principy práce rtg fluorescenčních spektrometrů, rtg lampy a jejich napájení, monochromátory, detektory a zpracování signálu elektronikou. Byly popsány rtg spektrometry ARL 74000 S, 72000 S a řada 8400 XRF.

Pro zpracování naměřených hodnot do procentických obsahů se používá výpočetních systémů na bázi použití počítačů PDP 11/03 a 23 fy DEC. Software je prakticky stejný jako pro emisní přístroje.

Byly uvedeny zkušenosti s provozem, servisem a systém pravidelných prohlídek.

Miroslav K o h o u t, Geoindustria n.p., Černošice : Rentgenfluorescenční spektrometry fy Philips

V přednášce byly podrobně popsány rtg spektrometry vyráběné fy Philips. Byly popsány dva typy sekvenčních spektrometrů PW 1410/50, PW 1400 a simultánní rtg spektrometr PW 1600. Podrobně byly popsány zdroj pro rtg lampu, spektrometr a elektronický vyhodnocovací systém. Byly podány podrobné informace programování simultánních a sekvenčních rtg spektrometrů. Pro zpracování naměřených výsledků se používají mini-počítače fy Philips a fy DEC.

V rámci přednášky byly podány informace o práci servisního střediska fy Philips v n.p. Geoindustria Černošice.

Karel K u b o ň, VZÚ NHKG, Ostrava : Ideální servisní technik - ideální uživatel

V přednášce byly sděleny informace o činnosti Koba - pracovní skupina pro laboratorní techniku se zvláštním zaměřením na cíle ve zlepšení servisní činnosti zahraničních firem z KS a ZST ve vazbě na PZO.

Dále byly předneseny optimální požadavky uživatelů na servis a optimální požadavky servisních inženýrů na uživatele. Taktéž byla přednesena úvaha o ideálních vztazích servisu a uživatele v rámci dobré spolupráce.

V závěru byly podány informace o činnosti odborné skupiny automatické spektrometrie v hutnictví.

## SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE

Odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie

24. pracovní schůze skupina na téma "Pulzní metody v NMR spektroskopii" se konala v Ústavu fyzikální metalurgie ČSAV v Brně dne 14.3.1984. Schůze, kterou připravil a řídil Dr. M. Holík, se zúčastnilo 29 pracovníků. Přinášíme resumé z přednesených příspěvků.

Vladimír S k l e n á ř, Zenon S t a r č u k, Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : Heteronukleární dekaplink - širokopásmová variace

Značná pozornost je v současné době soustředěna na hledání pulzních sekvencí, jejichž pomocí lze provádět kvalitní dekaplink v širokém rozmezí kmitočtů a s co nejmenšími nároky na vysokofrekvenční výkon. Byly popsány výsledky, jichž bylo dosaženo při  $^1\text{H}$  a  $^{19}\text{F}$  širokopásmovém dekaplinku pomocí cyklických sekvencí typu WALTZ založených na aplikaci složených vf pulsů

$$b\bar{X} (1+b)X (2-a)\bar{X} (3-a)X cX c\bar{X} ,$$

kde čísla 1, 2, 3 a parametry a, b, c udávají násobky základního úhlu rotace vektoru magnetizace  $1 = 90^\circ$  a X ( $\bar{X}$ ) označuje rotaci kolem kladného (záporného) směru osy X rotující soustavy souřadnic. Experimentálně bylo potvrzeno, že cyklická sekvence vytvořená na bázi složených pulsů s velikostí parametrů  $a = b = c = 0.33$  se vyznačuje dobrými vlastnostmi z hlediska jak šířky dekaplovaného kmitočtového pásma, tak i kvality dekaplinku.

Antonín L y č k a, Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice : Studium vlivu deuteria na  $^{15}\text{N}$  chemické posuny s využitím metody INEPT

Vliv deuteria byl studován pomocí  $^{14}\text{N}$  a  $^{15}\text{N}$ -NMR spekter, měřených buď v jedné nebo dvou koaxiálních NMR zkumavkách.

Pomocí  $^{14}\text{N}$ -NMR spekter lze tento efekt měřit pouze u látek  $\text{NH}_4\text{X}$ , vzhledem k pološifce signálů a velikosti izotopového posunu. Ostatní látky lze studovat pouze pomocí  $^{15}\text{N}$ -NMR spekter. U všech měřených látek (s výjimkou  $\text{CD}_3\text{CN}$ ) byl sekundární izotopový efekt, definovaný jako  $\Delta N = \delta N(\text{H}) - \delta N(\text{D})$ , pozitivní a hodnoty  $\Delta N$  byly v rozmezí 0,05 - 1,50 ppm. V případech, kde to bylo možné, byla využita metoda INEPT s použitím interakčních konstant  $^n\text{J}(^{15}\text{NH})$  ( $n = 1 - 3$ ).

Igor G o l j e r , Centrální laboratorium chemické techniky ČHTF SVŠT, Bratislava : Heteronukleární spin tickling

Technika spinového ticklingu je známa jako velmi užitečná technika při přiřadování signálů v  $^1\text{H}$  NMR spektrách. Dále byla využívána při přesném zistování polohy signálů jader s nízkým přirozeným výskytem jako  $^{13}\text{C}$ ,  $^{11}\text{B}$  a jiných, (měřením jejich satelitů v  $^1\text{H}$  NMR spektrách při současném ozařování jader s nízkou citlivostí). Tato technika může být velmi užitečná i v současnosti při přiřadování  $^1\text{H}$  nebo  $^{13}\text{C}$  NMR signálů ležících těsně při sebe v spektrách. Technikou heteronukleárního spin ticklingu je možné rozlišit signály lišící se vzdáleností od 3 do 10 Hz v  $^1\text{H}$  nebo  $^{13}\text{C}$  NMR spektrách, a urobiť ich vzájomné priradenie. Pri využití heteronukleárního spin ticklingu je možné u AX spinových systémů vyhnout se 2D heteronukleární COSY technice.

Zenon S t a r č u k , Vladimír S k l e n á ř , Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno : O jedné množině složených pulsů pro inverzi spinové populace v NMR

Problematice konstrukce složených vf pulsů je ve spektroskopii NMR vysokého rozlišení věnována v posledních několika letech mimořádná pozornost a to zejména v souvislosti s jejich uplatněním v širokopásmovém heteronukleárním dekaplinku a v řadě 2-D NMR experimentů. Výhody použití složených vf pulsů ve srovnání s jednoduchými pulsy spočívají zejména v jejich schopnosti zmenšit nepřesnosti v rotaci vektorů makroskopické magnetizace dané nesprávným nastavením výkonu vf pulsů, nehomogenitou vf pole a offsetovými vlivy.

V referátu byly popsány vlastnosti množiny složených pulsů, kterou lze definovat jako

$$R = b\bar{X} (1+b)X (3-a)\bar{X} (4-a+c)X c\bar{X}$$

kde čísla 1, 2, 3 a parametry a, b, c udávají násobky základního úhlu rotace  $1 = 90^\circ$ .  $\bar{X}$  označuje rotaci kolem kladného (záporného) směru osy X v rotující soustavě souřadnic. V závislosti na velikosti parametrů a, b, c lze získat složene vf pulsy pro inverzi spinové populace vyznačující se buď větší přesností inverze a menší šířkou invertovaného kmitočtového pásma nebo naopak.

Milena T u r e č k o v á , Jan H o r k ý , Tesla Brno k.p., Brno : Srovnání dekaplinku s použitím složených pulsů s šumovým dekaplinkem  $^1\text{H}$  u  $^{13}\text{C}$  NMR

K širokopásmovému dekaplinku protonů při měření jader  $^{13}\text{C}$  jsme využili nové sekvence složených pulsů, zajišťující inverzi podélné magnetizace, WALTZ-16. Tuto techniku jsme realizovali na novém typu spektrometru NMR TESLA BS 587, otestovali ji, aplikovali v řadě praktických experimentů a srovnali výsledky se stávající šumovou modulací, která byla dosud používána k širokopásmovému ozařování vodíků.

Kvalita nové dekaplovací metody WALTZ-16 byla hodnocena na základě experimentálních výsledků z několika důležitých hledisek :

1. Zajišťuje zdekuplování širokého efektivního protonového pásma ( $2\Delta B_3 \pm 5$  kHz) v intervalu offsetů  $\Delta B$  dané velikostí rf.pole  $B_2$  -  $B_2 < \Delta B < + B_2$ . Výstupní výkon dekapleru je 10x menší ( $\sim 0,8$  W) než při klasické šumové metodě ( $\Delta B = \pm 1$  kHz).
2. I v extréměch intervalu offsetů je malé zbytkové štěpení uhlíkového signálu  $J_R < 0,2$  Hz.
3. Vykazuje malou citlivost na nepřesnosti v zadání pulsní sekvence a na nedokonalosti přístrojové :  
a) dekaplovací rf.pole  $\gamma B_2/2\pi$  lze nastavit až o 5 % nižší,  
b) fázování  $0^\circ - 180^\circ$  zkompenzuje ještě chyby  $\pm 5^\circ$
4. Nezavádí do pozorovaného spektra  $^{13}\text{C}$  žádné výrazné parazitní signály. Metodou INADEQUATE dokázáno, že "cycling sideband" jsou menší než 0,5 %.
5. Jednoduché programování - ovládá se dvoupísmenovými povely v pulsní sekvenci.

Citlivost spektrometru vyrostla o 50 % ve srovnání s šumovou technikou ( $^{13}\text{C}$  - 90 % ethylbenzen, 1 scan) a v podmínkách dlouhodobé akumulace jsme dosáhli zlepšení citlivosti víc než 2x.

Odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie uspořádala dále dne 21.6.1984 mimořádnou schůzi na téma "Teplotní měření v NMR spektroskopii" a to u příležitosti 7.čs.spektroskopické konference v Českých Budějovicích. Schůzi, které se zúčastnilo přes 20 členů skupiny a 4 zahraniční hosté, připravil a řídil Dr.M.Holík. Účastníci se v živé diskusi shodli v názoru, že by výrobci spektrometrů měli věnovat více pozornosti konstrukci teplotní sondy a zajištění vyšší přesnosti měření, nastavení a stability teploty. Dále by bylo třeba vypracovat měřící postupy pro měření teplot při registraci jiných jader než  $^1\text{H}$ .

Přetiskujeme seznam základních publikovaných prací z oboru měření teplot v NMR spektroskopii se stručnými charakteristikami jednotlivých metod, jak byly dány k dispozici účastníkům schůze, neboť mohou posloužit i dalším zájemcům.

R.C. Neuman, V. Jonas : J. Am. Chem. Soc. 90, 1970 (1968)

A cooper-constantan thermocouple was placed inside a piece of tapered glass tubing sealed at the bottom and the top of the tube was clamped to a ring stand. The tube, which had an outside diameter of ca. 1 mm, was lowered into the spinning sample tube containing glycol.

A.L. van Geet : Anal. Chem. 40, 2227 (1968), 42, 679 (1970)

A thermistor probe fitting inside a 5 mm sample tube was built. A probe holder holds the probe in place and the probe does not touch the walls of the sample tube. It can spin freely around the stationary probe. The thermistor thermometer should be inserted to the right depth, since a temperature gradient occurs (0.5 K/cm at 233K). It should be remembered that the probe constitutes a heat leak; at 233K, the probe raises the temperature by 1K.

T. Drakenberg, K.I. Dahlquist, S. Forsén : Acta Chem. Scand. 24, 694 (1970)

The capillary with a temperature dependent liquid is held in sample tube by two teflon plugs. For calibration the upper plug is removed and a thermocouple contained in a narrow glass tube is lowered into the spinning sample tube until the signal begins to deteriorate. When stable conditions have been reached, the temperature and chemical shift difference are measured.

A. Steigel, J. Sauer, D.A. Kleier, G. Binsch : J. Am. Chem. Soc. 94, 2770 (1972)

Temperatures were measured by recording NMR signals of a thermometer liquid, contained in a sealed capillary (0.05 mm i.d.) within the sample solution, immediately before and after recording a spectrum. If the two temperatures differed by more than 0.5°, the spectrum was discarded and rerun. The teflon plugs for holding the capillaries in the tube were found to be dispensable if the capillaries extended 4±1 mm above the level of the surrounding liquid; under these conditions the capillaries automatically adjust themselves in the center at a spinning rate of 50 rpm.

H.-J. Schneider, W. Freitag, M. Schommer : J. Magn. Reson. 18, 393 (1975)

The "C-13 thermometer" is based on acetone-d<sub>6</sub>, the shift reagent Yb(fod)<sub>3</sub> and CS<sub>2</sub>. The shift between CO and CS is strongly temperature dependent (2.5-3 Hz/K at 22.5 MHz).

U. Berg : Can. J. Chem. 55, 2297 (1977)

The temperature was measured by means of the thermocouple fixed in the normal insert. This thermocouple was calibrated against a second thermocouple held inside the spinning NMR tube.

G. Becher, T. Burgemeister, H.-H. Henschel, A. Mannschreck : OMR 11, 481 (1978)

For temperature measurements a Bruker methanol tube (4% CH<sub>3</sub>OH, 96% CD<sub>3</sub>OD) was used which was calibrated by a Varian methanol tube using the van Geet formula.

O. Yamamoto, M. Yanagisawa : Anal. Chem. 42, 1463 (1970)

M.L. Kaplan, F.A. Bovey, H.N. Cheng : Anal. Chem. 47, 1703 (1975)

The ethylene glycol and methanol samples were calibrated by detecting the melting process of different substances placed in capillaries in the NMR sample tube. The appearance of sharp signals in the NMR spectrum characterizes the transition from the solid to the liquid state. (In order to observe the signals of the liquid, it is necessary that the conversion of a considerable part of the solid into liquid is achieved. Therefore, the temperature considered as the melting point may be higher than the real one.)

C. Piccinni-Leopardi, O. Fabre, J. Reisse : OMR 8, 233 (1976)

Glycol standard sample for H-1 DNMR studies and a thermometer for C-13 DNMR studies were calibrated with respect to melting points of pure substances. A capillary containing the melting solid is kept in the NMR tube by plugs. The solution surrounding the capillary is the same for the melting process observation as for the DNMR study. The size of the capillary is such (≤1 mm in diameter) that its perturbing effect on the magnetic properties of the sample can be considered as negligible. The temperature is raised by increments of 0.3°. At each temperature the tube is allowed to spin at least 15 min. and then it is quickly removed from the probe and examined visually. The solution which surrounds the capillary acts as a thermal bath, which prevents any fast variation of the capillary temperature.

H. Friebolin, G. Schilling, I. Pohl : OMR 12, 569 (1979)

The temperature in the probe of NMR spectrometers can be determined accurately by the clearing point of liquid crystals. This method is suitable for H-1 and C-13 measurements, has a margin of error of ± 0.2° in H-1 and 0.3° in C-13 NMR experiments and an accuracy 5 times greater than those of previously published methods.

#### Odborná skupina spektroskopie pevného stavu

Ve dnech 24. a 25.5.1984 se konaly přednášky prof. B. O. S e r a p h i n a (Optical Science Center, University of Arizona, Tucson, USA), zakladatele vědního oboru modulační spektroskopie. Prof. Seraphin se v posledních 10 letech intenzivně věnuje problémům přeměny solární energie, zejména výzkumu spektrálních a fotoelektrických vlastností materiálů, perspektivních v tomto oboru. Přinášíme abstrakta z přednášek prof. Seraphina, které přednesl ve Fyzikálním ústavu ČSAV za účasti 30 členů odborné skupiny.

B. O. S e r a p h i n , University of Arizona, Tucson, USA : Chemical vapor deposition of optical multilayer coatings

During the Thirties lenses were routinely coated by Chemical Vapor Deposition (CVD). The subsequent rapid development of vacuum technology provided numerous alternative methods that caused CVD to play only a minor role in the thirty years to follow. However, the recent expansion of the demands on



optical coatings gave CVD a new importance due to the many inherent advantages of the method. The basic promises and problems of the CVD approach to optical multilayer coatings will be reviewed. Some accomplishments of the CVD work at the Optical Sciences Center during the last ten years will be presented. The list includes reflector-absorber tandem systems for photothermal solar energy conversion at temperatures in excess of 500 C, thin molybdenum layers of infrared reflectance and electrical conductivity superior to those of films deposited by other methods, cermet coatings deposited from the vapor phase, and amorphous silicon films for solar applications stabilized against crystallization up to 1000 C.

B. O. S e r a p h i n , University of Arizona, Tucson, USA:  
Microstructure, composition, and the photo-electric properties of amorphous silicon solar cells

Costs of materials and their processing present serious obstacles to the wide-spread use of solar cells based on bulk materials. A more economic cell configuration should use as little active material as necessary. With the given solar flux density restricting the minimum area, the thickness of the active material is the only adjustable parameter. An ideal cell should not be thicker than the solar light can penetrate, and the photogenerated carriers can drift. Both lengths are in the order of one micron for most semiconductors, pointing to a thin-film approach as the most promising configuration. Structural and compositional imperfections limit the usefulness of most thin films, however. The basic solutions to this dilemma are described, and the most promising candidate materials discussed. This films of amorphous silicon rank high on the list. The control of their microstructure and composition in view of suitable photo-electric properties is the central research problem in this field.

## SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

Odborná skupina instrumentálních radioanalytických metod

Seminář "Spektrometrie záření gama v radioanalýze" za účasti 46 členů skupiny se uskutečnil dne 9. ledna 1984 v Praze. Přinášíme resumé z přednesených příspěvků.

Miroslav H o š p e s , Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů, Praha : Speciální problémy software PDP 11/23 užitých pro spektrometrii

V nedávné době jsme rozšířili na našem počítači PDP 11/23 vnitřní paměť na 128 KB a připojili 2 diskové jednotky RIO2. Jelikož dosud používáme systém RT-11, regenerovali jsme verzi RT11 x M, abychom mohli používat vnitřní paměť nad 32 KB nejenom prostřednictvím virtuálních polí, jak to bylo doposud u verze RT 11 FB (Foreground-background). Chtěli jsme na novém systému používat programy psané ve FORTRANU jako virtuální joby a uplatnit na rozšířenou paměť. Zjistili jsme, že:

- 1) Fortranské programy nemohou pracovat jako virtuální joby pod systémem RT-11
- 2) Fortranské programy pracující jako foreground nemohou používat rozšířenou paměť jako OVERLAY

Systém RT-11 jako systém pro počítač PDP s malou vnitřní pamětí není zřejmě příliš vhodný pro počítač s větší pamětí a je lépe přejít na systém RTX-11M.

Severín P o š t a , Ústav jaderného výzkumu, Řež :  
Jaderná data v neutronové aktivační analýze

S rozvojem nových metod a aplikací neutronové aktivační analýzy (NAA) rychle rostou i nároky na užitá jaderná data. Pokročilé matematické modely a výpočetní postupy, vypracované v posledním období, umožňují výstižnější popis některých závažných fází analytického procesu (např. aktivaci vzorků v jaderném reaktoru), avšak jejich efektivní využití závisí na spolehlivé znalosti vstupních parametrů příslušných rovnic, zejména jaderných konstant. Z tohoto důvodu je nutné

věnovat úloze jaderných dat v metodice NAA zvláštní pozornost.

V příspěvku je stručně zhodnocen současný stav a vývoj problematiky jaderných dat z hlediska potřeb NAA. Je uveden přehled nejdůležitějších institucí, knihoven, periodik a jiných literárních zdrojů, jejichž prostřednictvím lze získat aktuální nebo jinak požadované informace (např. soubory účinných průřezů, data rozpadových schémat radionuklidů, atd.). Z rozboru dostupných parametrů vyplývá, že v uplynulém desetiletí byl dosažen podstatný pokrok při zvyšování přesnosti tabelovaných hodnot jaderných konstant (např. podíl hodnot známých s relativní přesností  $s_r \leq 10\%$  se zvýšil v r. 1981

proti r. 1973 u účinných průřezů  $\sigma$ , ze 16 % na 78 %, u rezonančních integrálů  $I_0$  dokonce z 6 % na 63 %). Naproti tomu lze snadno prokázat v mnoha případech nízkou konsistenci uváděných hodnot, a to jak uvnitř sledovaných souborů dat, tak i vzhledem k různým modelům aktivace resp. jiným parametrům. Tato situace je v referátě zdůrazněna a názorně dokumentována na řadě vhodných příkladů. Je také ukázáno, že používání různorodých zdrojů jaderných konstant (především rezonančních integrálů a emisních pravděpodobností  $\gamma$ -záření) může vést v postupu NAA k hrubým nebo systematickým chybám při optimalizačních, standardizačních a korekčních výpočtech. Rovněž je konstatována skutečnost, že stávající neurčitost jaderných konstant je doposud hlavním omezujícím faktorem, který brání rychlému rozšíření všeobecně výhodných parametrických (absolutních) metod NAA.

Nové zprůsvěněné požadavky pracovníků v oboru NAA na přesnost, správnost a konsistenci jaderných dat se promítají do vlastní odborné činnosti dvojnásobem. Studují se jednak možnosti využití tzv. složených jaderných konstant ( $k_0, 2$ ), které lze měřit vysokou přesností (2 %) bez větších nesnází pomocí experimentálního zařízení běžně vybavené laboratoře NAA, jednak se vyvíjejí nové metody kritického hodnocení konsistence jaderných dat. Výsledky těchto studií, konaných za široké mezinárodní spolupráce významných laboratoří, lze očekávat již v blízké budoucnosti.

Vladimír H n a t o w i c z , Ústav jaderné fyziky ČSAV,  
Řež : Jak přesně se měří energie a intenzity ve spektroskopii záření gama ?

V příspěvku byl podán stručný přehled o faktorech ovlivňujících přesnost stanovení energií a intenzit přechodů gama při měření s polovodičovými detektory. Energie a intenzity se ve spektroskopii gama neměří přímo, ale určují se z polohy a plochy spektrálních čar pomocí příslušných kalibračních křivek. Jejich průběh se zjišťuje experimentálně, měřením souboru vhodných normálů. Limitní dosažitelná přesnost při stanovení energií a intenzit je určena přesností s jakou jsou známy hodnoty normálů.

Existující soustava energetických normálů umožňuje určovat energie záření gama s přesností  $(2,6 - 3,0) \times 10^{-6}$  v oboru energií do 0,7 MeV a s přesností  $(4,0 - 6,0) \times 10^{-6}$  v oblasti od 0,7 do zhruba 4,5 MeV. Relativní intenzity silných přechodů gama v energetickém oboru do 3,5 MeV se určují s přes-

ností 0,5 - 1 % měřeními na polovodičových detektorech kalibrovaných pomocí normálů, jejichž aktivity a emisní pravděpodobnosti jsou přesně známy z nezávislých měření.

Tomáš B o u d a , Ústřední laboratoře ČSÚP, Stráž pod Ralskem : Soubor programů pro zefektivnění řízení a kontroly analyzátoru CANBERRA S-80 napojeného na počítač PDP-11/34A

Byla podána informace o souboru programů vyvinutých v Ústředních laboratořích ČSÚP, které zefektivňují práci se spektrometrickým systémem CANBERRA-JUPITER 80. Program S80 slouží k rychlému nastavení parametrů spektrometrického systému, program ODB odstraňuje potíže spojené s častým zablokováním membránové klávesnice analyzátoru. Programy KEY, DAT a EMU emulují na počítačovém terminálu práci s klávesnicí analyzátoru - DAT umožňuje vstoupit kod vzorku do identifikačního pole každé jednotky, KEY řídí měření na jednotlivých spektrometrických trasách a EMU vyhodnocuje naměřená spektra pomocí firmware analyzátoru S-80. Programy jsou psány v jazyku MACRO-11 pod operačním systémem RSX-11M v.3.2.

Tomáš B o u d a , Ústřední laboratoře ČSÚP, Stráž pod Ralskem : Informace o činnosti uživatelů počítačů DEC a SMEP

Tématem přednášky byla informace o činnosti Odborné skupiny aplikací minipočítačů a řídicích počítačů (OSAMRP), která sdružuje uživatele výpočetních systémů DEC a SMEP (v současné době cca 150 členů). Činnost skupiny je zaměřena ryze pracovní - ročně se konají dva jednodenní semináře (Brno, Praha), na kterých se uživatelé informují o nových počítačových systémech, o firemním software a i o programech vyvinutých na jednotlivých pracovištích, vyměňují se vyvinuté programy (z příspěvků dodaných na každý seminář se pořizuje společná magnetická páska). Vzhledem k tomu, že je v současné době prakticky každý mnohokanálový analyzátor napojen na malý počítač (přičemž převažují systémy PDP fy DEC, USA), stává se členství v této skupině téměř nutností. Přináší totiž tyto výhody : bezplatný přístup ke knihovně programů (v současné době jsou členové skupiny též členy skupiny DECUS EUROPE At-large), v případě poruchy systému nebo jeho části je možno rychle získat potřebné informace (případně i náhradní díl), při rozšiřování systému perifériemi RVHP lze najít vždy někoho, kdo tuto periférii připojoval atd.

Ivan P o š t a , Ústřední laboratoře ČSÚP, Stráž pod Ralskem : Připojení jednotek systému SM-4 k počítači PDP 11/34a

Řídicí počítač PDP 11/34a měřicího systému CANBERRA-JUPITER je rozšiřován rovněž jednotkami systému SM-4, avšak desky interface SM-4 nejsou kompatibilní se systémem PDP-11. Proto je rozšíření realizováno připojením celého rozšiřujícího stojanu SM-4. Propojovací kabel je sestaven z upraveného kabelu SM 2811 (systém SM-4), ke kterému byl připojen konektor kabelu M 9202 (systém PDP-11). Rozšiřující stojan obsahuje vlastní zdroje a dovoluje zvýšit počet zátěží UNIBUSU o dalších 15.

V uvedeném případě jsou takto připojeny dvě magnetické páskové paměti SM 5300.01, mozaiková tiskárna SM 1156 a asynchronní multiplexor, umožňující připojení až 8 videoterminálů SM 7202.

## KOMISE

### Přístrojová komise

Na stránkách tohoto Bulletinu publikovala přístrojová komise svůj úmysl budovat reprezentativní fond firemní literatury, který by byl všem členům Společnosti snadno přístupný (Bulletin 36, 18 (1981)). V souladu s tímto úmyslem kontaktovala písemně 183 zahraničních firem, které informovala o své snaze a požádala o zaslání nejnovější firemní literatury, příp. ceníků. Obdržela 74 odpovědí a cca 800 ks firemní literatury (dalších cca 600 ks jako druhý exemplář).

Aby zajistila dobrou přístupnost všech těchto materiálů, předala je k dalšímu zpracování a zpřístupnění oddělení firemní literatury ÚVTEI - Státní technická knihovna, Klementinum, nám.dr.Vacka 5, 113 07 Praha 1. Zde jsou tyto materiály k dispozici za stejných podmínek jako ostatní firemní literatura shromažďovaná tímto oddělením s jedinou výhradou: materiály námi poskytnuté jsou označeny razítkem "Čs.spektroskopická společnost" a nesmějí být zařazovány do tzv. tematických řad. To dává možnost studovat opravdu nové materiály. Studovna je k prezenčnímu studiu či k výpůjčkám mimo knihovnu (maximální výpůjční lhůta 4 týdny) přístupna denně od 9 do 15 hodin, telefon 246 670, 265 113, 266 261 a další, linka 474 (studovna), 464 (vedoucí oddělení).

Ústav geologie a geotechniky ČSAV, oddělení spec.metod,  
182 09 Praha 8 - Liben, V Holešovičkách 41, hledá tzv.

otevřený jiskrový stativ k spektrografu Zeiss PGS 2

Tento stativ byl dodáván pro čtyřbokou optickou lavici uvedeného přístroje v dřívějších letech, poté byl nahrazován tzv. uzavřenými stativy. Typové označení otevřeného stativu je FS 7. Nabídky adresujte Ing.Absolonovi nebo vedoucímu oddělení Dr.Pecharovi.

## SOUTĚŽ MLADÝCH SPEKTROSKOPIKŮ

Druhý ročník soutěže, kterou Čs.spektroskopická společnost vypisuje k podpoření zájmu o vědeckou, výzkumnou a vývojovou práci, byl obeslán podstatně větším počtem prací než ročník předcházející. To sice ztížilo práci poroty, ale na druhé straně bylo možné konstatovat, že nastupující generace spektroskopiků drží krok s vývojem svých vědních oborů. Žádná z přihlášených prací neměla úroveň nižší, než je současný standard pro odborné sdělení či studii. O pořadí pro udělení cen nakonec rozhodl objem prací, resp. šíře pojednávané problematiky a její ucelenost.

Mimořádnou pozornost mezi přihlášenými pracemi vzbudil soubor studií, technické dokumentace a patentů Ing.Jiřího Doležala, CSc a Ing.Roberta Hlaváče k vývoji elektrotermického atomizátoru AAS WETA 82. Oba autoři, jako členové početnějšího vývojového týmu, prokázali významný podíl samostatné práce na vývoji přístroje, který byl již zařazen do výrobního programu n.p. Laboratorní přístroje. Porota zvážila i okolnost, že autoři zvládli nejen teoretickou a experimentální přípravu atomizátoru, ale vytrvali i na obtížné cestě k realizaci prototypu a zavedení přístroje do výroby. Přístroj WETA 82 je nesporným obohacením našeho trhu a dobře reprezentuje úroveň čs.výzkumu a vývoje. Proto byla autorům přiznána i zvláštní cena Čs.spektroskopické společnosti.

Výsledky soutěže mladých spektroskopiků za rok 1983 jsou následující:

1.cena + zvláštní cena ČSSS : Ing.Jiří Doležal, CSc  
(SLS ČSAV a VŠCHT, Praha)  
Ing.Robert Hlaváč (VŠCHT Praha)

1.cena : Dr.Štefan Urban, CSc (ÚPCHE J.H.ČSAV, Praha)

2.cena : nebyla udělena

3.cena : Ing.Lenka Kolínská-Svobodová (FÚ UK, Praha)

3.cena : Dr.Marie Urbanová (MPF UK, Praha)

3.cena : Dr.Miroslav Kučera (FÚ ČSAV, Praha)

Redakce Bulletinu požádala autory oceněných prací o krátká pojednání o předmětu jejich soutěžní práce, která dále uvádíme :

Jiří D o l e ž a l , Společná laboratoř pro chemii a technologii silikátů ČSAV a VŠCHT, Praha, Robert H l a v á č , VŠCHT, Praha : WETA 82-wolframový elektrotermický atomizátor

Přístroj (ve spojení se spektrometrem pro AAS) je určen pro stanovení stopových prvků metodou atomové absorpční spektrometrie s elektrotermickou atomizací.

Zapojení přístroje dovozuje plynulou regulaci doby trvání pracovních cyklů a teploty ve všech pracovních cyklech. Teplota atomizátoru při sušení a termické úpravě vzorku je řízena zpětnovazebnou regulací vkládaného napětí. Při atomizaci je teplota ovládána zpětnovazební smyčkou zahrnující přímé snímání teploty atomizátoru pomocí fotodiody. Dosažitelná rychlost ohřevu atomizátoru na atomizační teplotu je o řád vyšší, než rychlost dosahovaná u komerčně vyráběných grafitových atomizátorů. Tato skutečnost má za následek dosažení vysoké citlivosti stanovení většiny prvků a způsobuje, že středně a těžko těkavé prvky atomizují prakticky za izotermických podmínek.

Analytické parametry elektrotermického atomizátoru "WETA-82" dosahují kvality komerčně vyráběných přístrojů stejného typu dovážených z devizové oblasti (a v některých ukazatelích je překračují). Ve srovnání s grafitovými atomizátory má vynikající vlastnosti pro stanovení prvků, které reagují s grafitovou podložkou za tvorby těžko těkavých sloučenin.

Atomizátor "WETA-82" se zejména uplatňuje při analýze vzorků souvisejících s ochranou životního prostředí (analýza vody, ovzduší, potravin), při kontrole jakosti nejrůznějších surovin a výrobků chemického a farmaceutického průmyslu (např. při sledování čistoty speciálních chemikálií pro elektroniku a sdělovací techniku), v biochemických a klinických laboratořích, v agronomii aj.

Štefan U r b a n , Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J.H. ČSAV, Praha : Analýza vibračně-rotačních spekter vysokého a velmi vysokého rozlišení molekul typu XY<sub>3</sub>

Rychlý rozvoj elektroniky, výpočetní a laserové techniky v posledních desetiletích výrazně změnil experimentální základnu rotační a rotačně vibrační spektroskopie molekul v infračervené a mikrovlnné oblasti. Obří dispersní přístroje byly překonány rychlými FT spektrofotometry, které nyní dosahují řádově vyšší rozlišení ( $\sim 5 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ ) při relativní přesnosti až  $1 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$ . Vedle toho jsou rozvíjeny speciální metody, které využívají k dalšímu výraznému zvýšení rozlišovací schopnosti jednak spojitě laditelné lasery (např. laser-diodová spektroskopie) a jednak efekty nelineární optiky (např. sub-dopplerovská dvoufotonová a saturační spektroskopie).

Tato kvalitativně nová experimentální základna přináší zcela nové možnosti při studiu velmi jemných efektů molekulární dynamiky, při měření zcela nových typů spektrálních přechodů

a poskytuje možnost studovat tvar a intenzity spektrálních linií bez vlivu zkreslení přístrojovou funkcí.

Většina prací předložených do soutěže je zaměřena na měření mikrovlnných a infračervených spekter vysokého rozlišení isotopických modifikací molekuly amoniaku a především jejich teoretickou interpretaci. Práce tak navazují na několikaleté teoretické studium molekulové inverze na oddělení molekulové spektroskopie ÚFCHE J. Heyrovského ČSAV. Molekula amoniaku, díky svému inverznímu pohybu a neobyčejně vysoké anharmoničnosti vibrace, je vďečným modelem pro studium nejrozmanitějších anomálií molekulární dynamiky. Získané poznatky pak mohou být zobecněny a použity při studiu jiných molekul, což je prezentováno ve zbývajících pracích.

Vedle získaných "spektroskopických" poznatků mezi hlavní výsledky těchto prací dále patří zejména stanovení nového kalibračního standardu -  $\nu_2$  pásu  $^{14}\text{NH}_3$ . Přesnost vypočtených linií vibračně inverzně rotačních přechodů v oblasti  $700 - 1100 \text{ cm}^{-1}$  je lepší než  $0,0001 \text{ cm}^{-1}$ . Neméně důležité jsou přesné molekulární parametry, které umožňují počítat s vysokou přesností energetické hladiny. Toto pak dovozuje na jedné straně získat přesné partiční funkce i pro nízké teploty ( $0 - 100 \text{ K}$ ) a dále určení vlnočtů rotačně inverzních přechodů v daleké infračervené oblasti s přesností, která řádově přesahuje současné experimentální možnosti. Tyto informace mají výrazný astrofyzikální aspekt, zejména pro hojně rozšíření amoniaku v interstelárním prostoru a v atmosférách planet. Přesné stanovení partiční funkce dovozuje počítat rovnovážné populace molekul v různých energetických stavech a současně z poměru intenzit měřených spektrálních přechodů dedukovat rovnovážnou teplotu mezihvězdné hmoty, odchylky od termodynamické rovnováhy nebo také relativní poměry výskytu isotopů. Přesnost frekvencí je zase užitečná pro studium relativních rychlostí pohybů vzdálených objektů z Dopplerových posunů.

Marie U r b a n o v á , katedra chemické fyziky MFF UK, Praha : Studium fluorescenčních vlastností tenké vrstvy chlorofylu-A

Spektroskopické metody představují významnou metodiku studia primárních dějů fotosyntézy v systémech in vivo i in vitro. Obsahem předkládaných prací je aplikace fluorescenční spektroskopie při studiu fyzikálních vlastností modelového světlosběrného systému fotosyntézy (antény) a řešení problému, který úzce souvisí s touto studií, totiž respektování a numerické odstranění efektu reabsorpce na fluorescenční spektra.

V první práci byl poprvé použit chlorofyl a zabudovaný do polystyrénové folie jako model pasivního světlosběrného systému fotosyntézy. Porovnání koncentračních závislostí průběhu fluorescenčních spekter, kvantových výtěžků fluorescence, dob života a teplotních závislostí dob života fluorescence totiž ukázaly účinný přenos excitační energie od monomerů chlorofylu k asociátům, který je podstatný pro funkci fotosyntetické antény.

Měření fluorescenčních charakteristik v širokém koncentraci

tračním oboru je silně ovlivněno jevem reabsorpce, který má negativní důsledek pro kvantitativní zpracování výsledků. V druhé práci je navržen a použit matematický formalismus pro korekci spektrálního průběhu fluorescence na reabsorpci pro případ diskutovaného modelu fotosyntetické antény - tenkých folií se zabudovaným barvivem. Naměřené experimentální výsledky jednoznačně ukazují, že efekt reabsorpce vede zejména při velkých koncentracích v závislosti na prostorovém uspořádání experimentu až k drastickým distorzím fluorescenčního spektra. Současně numerické výsledky ukazují, že navržený postup korekce spektra dává kvalitní obraz o průběhu skutečné spektrální závislosti.

Lenka K o l í n s k á - S v o b o d o v á , Fyzikální ústav UK, Praha : Studium spekter magnetooptického Kerrova jevu ve viditelné a blízké ultrafialové oblasti

Obor magnetooptiky se v posledních letech neustále rozvíjí a rozšiřuje. Měření optických a magnetooptických spekter umožňuje objasnění struktury energetických hladin magnetických elektronů.

Práce přihlášené do soutěže se týkají spekter komplexního Kerrova magnetooptického jevu v oboru energií 2 - 6 eV. V práci můžeme rozlišit tři hlavní oblasti.

1. Jedná se o spektra několika granátů substituovaných vzácnými zeminami. Na základě srovnání se známými spektry základních materiálů tohoto typu (YIG) byl stanoven různý vliv iontů vzácných zemin se slupkou 4 f zaplněnou méně nebo více než do poloviny. Dále byly rozšířeny poznatky o vlivu  $\text{Pr}^{3+}$  na tato spektra.
2. Měření komplexního Kerrova jevu při šikmém úhlu dopadu pro obě základní polarizace dopadajícího světla bylo využito ke stanovení prvků tenzoru elektrické permitivity, v němž jsou z fenomenologického hlediska obsaženy všechny materiálové vlastnosti. Dosavadní způsob určování optických konstant ze spekter reflektivity trpí několika nedostatky; měření je třeba provádět v podstatně širším oboru energií, projevuje se vliv povrchu na amplitudy. Elipsometrická metoda může poskytnout ekvivalentní nebo i úplnější informace. Je však ještě potřeba zaměřit pozornost na optimální volbu úhlu dopadu a na kvalitu vzorku.
3. Substituce  $\text{Bi}^{3+}$  v železných granátech byla před časem intenzivně studována, neboť se zjistilo, že přítomnost  $\text{Bi}^{3+}$  značně zesiluje magnetooptické jevy v granátech, podobně jako  $\text{Pr}^{3+}$ . Tyto anomálie souvisí s interakcemi  $\text{Bi}^{3+}$  s ionty  $\text{Fe}^{3+}$ , které v granátech obsazují tetraedrické i oktaedrické polohy. Měření spektra ortoferitu  $\text{YFeO}_3 \cdot \text{Bi}^{3+}$ , který obsahuje pouze oktaedrické ionty  $\text{Fe}^{3+}$ , bylo využito k vyjasnění povahy této interakce. Porovnáním se spektrem  $\text{YFeO}_3$  se ukázalo, že  $\text{Bi}^{3+}$  má i zde vliv na Kerrova spektra, ale zvýšení magnetooptického jevu není tak výrazné.

Miroslav K u č e r a , Fyzikální ústav UK, Praha : Studium optických a magnetooptických vlastností železitých granátů

V rámci systematického výzkumu optických a magnetooptických vlastností ferimagnetických granátů typu  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  jsem se zabýval experimentálním studiem vlastností optických přechodů mezi  $3d^5$  hladinami iontů  $\text{Fe}^{3+}$  a problémem elektronové struktury granátových systémů.

První přístup vycházel ze studia jednopodmřížkových ferimagnetických granátů, kde magnetické ionty železa obsazovaly pouze jednu ze dvou dovolených krystalografických poloh - buď oktaedrickou nebo tetraedrickou polohu. Na základě podrobného studia spekter optické absorpce v oblasti 8 000 až 30 000  $\text{cm}^{-1}$  byly pomocí teorie krystalografického pole identifikovány jednotlivé absorpční pásy odpovídající přechodům mezi  $3d$  hladinami železitých iontů ze sextetového základního stavu  $^6\text{S}$  na kvartetové stavy  $^4\text{G}$ ,  $^4\text{P}$ ,  $^4\text{D}$  a  $^4\text{F}$ .

Další přístup vycházel ze studia magnetooptických vlastností (Faradayovy rotace) granátu  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  selektivně substituovaného diamagnetickými ionty  $\text{In}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$  a  $\text{Bi}^{3+}$  v jednotlivých krystalografických polohách. Práce sledovaly myšlenku separace příspěvků v magnetooptických jevech a podařilo se vypočítat spektra magnetooptických koeficientů v oblasti 4 000 až 20 000  $\text{cm}^{-1}$ , reprezentující příspěvky od iontů  $\text{Fe}^{3+}$  v jednotlivých polohách.

Vydává 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 červen 1984  
Pouze pro vnitřní potřebu.