



Československá spektroskopická společnost
CZECHOSLOVAK SPECTROSCOPIC SOCIETY

Bulletin

Čs. spektroskopická sp.
příj. č. 53
KNIHOYEN
Příj. č. 53

44
1984

B u l l e t i n
Čs. spektroskopické společnosti

Číslo 44

prosinec 1984

Z obsahu 44. čísla Bulletinu:

	str.
Zprávy ze Společnosti	2
Zpráva o 7. čs. spektroskopické konferenci a VIII. CANAS /Č. Budějovice, červen 1984/	3
Udělení plaket J.M. Marci za rok 1984	11
Sekce molekulové spektroskopie:	
Zpráva o Letní škole NMR - 1984	13
25. pracovní schůze OS pevného stavu	14
Sekce speciálních spektroskopických metod:	
III. čs. konference o jiskrové a sekundárně iontové hmotnostní spektrometrii	15
Seminář OS lokální mikroanalýzy /Brno, říjen 84/	16
24. pracovní schůze OS rtg spektrometrie	16
15. pracovní schůze OS hmotnostní spektrometrie	18
8. pracovní schůze OS elektronové a iontové spektroskopie	19
Seminář o instrumentální aktivační analýze IAA 84	19
Zprávy	
Symposium o aktuálních problémech ve spektroskopii /Moskva, červen 1984/	22
2nd Advanced Seminar on Infrared and Raman Spectroscopy (Dresden, listopad 1984)	23

Zprávy ze Společnosti

Ve 4. čtvrtletí 1984 se konalo 5 schůzí předsednictva Hlavního výboru Společnosti. K nejzávažnějším bodům jednání patřily:

- uzavření soutěže mladých spektroskopiků za rok 1984
- vydání brožury k 35. výročí založení organizované spektroskopie v ČSSR
- jednání Komise pro spolupráci s Chemickou společností
- vypracování návrhu na udělení plaket Jana Marca Marci za rok 1984
- návštěva doc. Dittricha z Lipska /NDR k upřesnění spolupráce
- příprava programu 38. schůze Hlavního výboru Společnosti
- projednání organizace semináře OS nevodivých materiálů /se zahraniční účastí/ jako náhrady za Prekolokvium /srpen 1985 - Bratislava/.

Dne 10. prosince 1984 se ve velké zasedací síni VŠCHT v Praze konala 38. schůze Hlavního výboru Společnosti. Schůzi řídil předseda Společnosti Dr Jan Mráz.

Ing. Trška podal zprávu o činnosti předsednictva za uplynulé období.

Dr Mráz a Dr Špačková předali plakety Jana Marca Marci za rok 1984 Dr Hānušovi a Dr Smolerovi.

Dr Mráz informoval o spolupráci s Chemickou společností na přípravě zprávy o zajištění rozvoje spektroskopických metod, která je připravovaná pro předsedu ČSAV.

Dr Špačková podala zprávu o 7. čs. spektroskopické konferenci a VIII. CANAS. Konference se zúčastnilo 607 účastníků z 20 zemí. Bylo předneseno 67 vyzvaných přednášek /18 ze zemí RVHP, 16 ze zemí KS, 333 z ČSSR/, 281 krátkých sdělení ve formě posterů /172 z ČSSR, 7 z KS, 102 ze zemí RVHP/, na výstavě přístrojů bylo předneseno 10 přednášek a 2 krátká sdělení. Při konferenci se konala schůzka národních delegátů ze zemí RVHP; bylo dohodnuto, že desátá konference CANAS se uskuteční v PLR. IX. konferenci CANAS zajišťuje NDR. V rámci konference byly uděleny plakety Jana Marca Marci prof. Zilbersteinovi, prof. Stegerovi, prof. Rautschke, prof. Zimmerovi, prof. Laquovi, prof. Beynonovi, prof. Kirkbrightovi, prof. Chakrabartimu, Dr Scottovi, Dr Špačkové a Dr Sychrovi.

Zvláštní pamětní plaketa byla udělena vedoucímu tajemníku jihočeského KV KSČ s. Miroslavu Slavíkovi. Stručná zpráva o konferenci bude publikována v European Spectroscopy News.

Dr Sychra ve zprávě o odborné činnosti upozornil, že se ruší pořádání Prekolokvia. Odborná skupina nevodivých materiálů uspořádá náhradní seminář se zahraniční účastí na téma "Pokroky a využití optické emisní spektroskopie v praxi".

Doc. Ksandr ve zprávě o zahraničních stycích uvedl, že bylo schváleno pozvání 8 zahraničních přednášejících; byla uzavřena dohoda o spolupráci s jugoslávskou spektroskopickou společností a jedná se o spolupráci s maďarskými spektroskopiky a se spektroskopiky z NDR. Tématický zájezd na XXIV. CSI je

ve stadiu jednání.

Ing. Karhan přednesl odborné posudky k pracem přihlášeným do soutěže mladých spektroskopiků za rok 1984. Hlavní výbor rozhodl o udělení cen: dvě první ceny /Dr Pavluch, Dr Štěpánek/ a dvě třetí ceny /Ing. Dybal, Ing. Oswald/.

Ing. Kosina podal zprávu o hospodaření. Společnost má 329 kolektivních členů. Znovu se upozorňuje na nutnost vyřešit otázku úhrady členských příspěvků za ústavy ČSAV. V zájmu aktualizace členské kartotéky bude všem členům zaslán dotazník.

Zpráva o 7. čs. spektroskopické konferenci a VIII. CANAS, České Budějovice, 18. - 22.6.1984 /akce č. 84/1984/

Organizační výbor 7. spektroskopické konference vypracoval Zprávu o konání 7. čs. spektroskopické konference a VIII. CANAS, v níž se podrobně zabýval posláním, organizačním zajištěním a hodnocením odborného a společenského programu konference. Vzhledem k rozsáhlosti zprávy uvádíme v následujícím jen některé její články.

Při příležitosti 35. výročí založení organizované spektroskopie v ČSSR uspořádala československá spektroskopická společnost při ČSAV ve spolupráci s provozně ekonomickou fakultou Vysoké školy zemědělské v Českých Budějovicích 7. čs. spektroskopickou konferenci a VIII. CANAS /Conference on Analytical Atomic Spectroscopy/.

Uspořádáním VIII. CANAS /konference o analytické atomové spektroskopii zemí RVHP, které se konají ve dvouletých cyklech/ byla pověřena čs. spektroskopická společnost při ČSAV na schůzi národních delegátů zemí RVHP při zasedání VII. CANAS v červnu 1982 v Soproni v Maďarsku.

Souhlas k uspořádání konference byl dán odborem zahraničních styků ÚP ČSAV dopisem čj. 29.757/83-ZHO ze dne 16.2.1983.

Konference se konala pod záštitou jihočeského krajského výboru Komunistické strany Československa v čele s čestným předsednictvem se složení:

předseda - s. Miroslav Slavík, ved. tajemník JKV KSČ

členové - s. František Samec, předseda JČ KNV

s. František Čápek, tajemník JKV KSČ

s. Vladimír Krafl, tajemník JKV KSČ

s. Miroslav Vacek, předseda MěNV Č. Budějovice

s. Vladimír Krupauer, děkan provozně ekonomické fakulty VŠZ

s. Vladimír Landa, ředitel Jihočeského centra ČSAV

s. Milan Šmid, GR Koh-i-noor
s. František Skřičil, GR Státní rybářství
s. Bohumil Olšan, GR státní stytky Šumava
s. Bedřich Sůva, GR Čs. vzduchotechnika
s. Jan Mráz, předseda Čs. spektroskopické společnosti

Hodnocení odborného programu

/vypracovali Dr Sychra, Dr Závětová, Ing. Moravec, Ing. Hulínský a Ing. Šlár/

A. Sekce optické atomové spektroskopie

V atomové sekci odezněl největší počet orálních přednášek a byl prezentován největší počet posterů. Z 20 pozvaných zahraničních hostů se s vyžádanou přednáškou dostavilo 18 a lze konstatovat, že se na 7. čs. spektroskopické konferenci podařilo získat z oboru atomové spektroskopie opravdu špičkové odborníky.

Orální přednášky byly předneseny v rozsahu 40 minut a lze je podle tematiky rozdělit do tří hlavních skupin:

1. příspěvky věnované atomové emisní spektroskopii s klasickými excitačními zdroji
2. příspěvky k atomové emisní spektroskopii s indukčně vázaným plazmatem /ICP/
3. příspěvky věnované atomové absorpční spektroskopii s elektrotermickou atomizací /ETA/

První tématice bylo věnováno 5 přednášek, z nichž nejvíce zaujal přehledný referát prof. Laquy /NSR/ o nových poznatcích ve vývoji spektroskopických excitačních zdrojů pro vysoce přesnou analýzu, dále přednáška prof. Nickela /NSR/ o využití emisních spektroskopických metod pro analýzu reaktorových materiálů a přednáška prof. Plška /ČSSR/ věnovaná metrologickým problémům a přehlednému hodnocení analytických spektroskopických dat.

Všech 5 vyzvaných přednášek věnovaných ICP mělo vysokou úroveň a všechny nesporně přispěly k propagaci této metody u nás, ať už to byla přednáška prof. Barnese /USA/ o problémech souvisejících s aplikací ICP při analýze biologických materiálů, přednáška prof. Mermeta /Francie/ o roli spektrálních interferencí v ICP spektrometrii či úvodní referát prof. Zilberšteina /SSSR/ o možnostech analýzy pevných vzorků a další.

Příspěvky věnované atomové absorpční spektrometrii s elektrotermickou atomizací /celkem 7/ měly společného jmenovatele jednak v hledání prostředků pro zajištění atomizace za izotermických podmínek - k této problematice se vyslovili prof. Chakrabarti a Dr. Sturgeon /Kanada/, Dr. Frech /Švédsko/ a Dr. Sychra /ČSSR/ - jednak v hledání alternativních materiálů pro ETA. O těchto možnostech hovořili Dr. Ortner /Rakousko/, Dr. Price /Velká Británie/ a další.

Atomové fluorescenční spektrometrii /AFS/ byla věnována jediná přednáška Dr. Rossiho /Itálie/ o využití laditelných laserů při analýzách metodou AFS.

V sekci posterů bylo prezentováno celkem 128 příspěvků, které by se z velké části daly zařadit do výše zmíněných tří tematických celků. Z konkrétních analytických aplikací byly nejpočetněji zastoupeny příspěvky věnované analýze biologických materiálů a vzorků souvisejících s ochranou životního prostředí.

Na výstavě přístrojů, zajišťované v areálu výstaviště Země živitelka prostřednictvím agentury Rapid, měla v oboru atomové spektrometrie největší expozici firma Pye Unicam - Philips. Vůbec poprvé v Československu byl v Českých Budějovicích vystavován simultánní AFS-ICP spektrometr firmy Baird-Atomic, využívající pro atomizaci vzorku indukčně vázaného plazmatu a pro excitaci atomové fluorescence pulsně buzené výbojky. Velký zájem byl též o tuzemské přístroje WETA 82 a zejména o Trace-Hg-Monitor, využívající mikroprocesor čs. výroby.

7. čs. spektroskopická konference a VIII. CANAS znovu potvrdily již delší dobu známý fakt, že hlavním středem zájmu v oblasti atomové spektroskopie zůstávají z celosvětového hlediska emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem /stále více orientovaná do aplikační sféry/ a atomová absorpční spektrometrie s elektrotermickou atomizací. Je příjemné konstatovat, že čs. spektroskopie v těchto oblastech nezůstává pozadu, i když rychlejšímu rozvoji ICP spektrometrie u nás brání nedostatek poměrně nákladných komerčních přístrojů.

B. Sekce molekulové spektroskopie

Zasedání sekce se zúčastňovalo ve větší zasedací síni /Theatre 1/ cca 65 a v menší zasedací síni /Theatre 2/ cca 35 účastníků.

V programu došlo ke 3 změnám, které se nejnepříjemněji projeví absencí 2 plenárních řečníků /Orville-Thomas, Winnewisser/ v 1. den konference. Situace byla vyřešena přesunem posledních dvou přednášek plánovaných původně na závěr konference.

Za nepřítomnou Dr. Vancu /RLR/ přednesl svou přednášku "FTIR-spectrometer and ellipsometry" Dr. Tilgner /NDR/.

S molekulární tematikou odeznělo celkem 21 vyžádaných přednášek, z toho 10 z oboru vibrační spektroskopie, 5 ze spektroskopie pevného stavu, 4 z magnetické resonance a po jedné ze spektroskopie vysokého rozlišení a elektronové spektroskopie. Prezentováno bylo na 80 posterů /někteří původně přihlášení autoři se nedostavili, místo nich ale byly vyvěšeny některé neohlášené postery/.

V obou skupinách molekulové sekce byl přesně dodržován časový rozvrh, takže bylo možno sledovat přednášky podle výběru /též díky skutečnosti, že oba sály byly pod jednou střechou/. Přednášky vzbudily předpokládaný zájem, což je možno

posoudit podle živých ohlasů v diskusi, která se protahovala i do přestávek; při nich se vhodně využíval jak bufet, tak i malá konferenční místnost v suterénu. Postery měly ve většině případů i velice dobrou formální úroveň. Odborná úroveň byla též na výši, protože zájem nepolevoval ani po vymezených hodinách.

Skupina magnetické rezonance uspořádala mimo program ve čtvrtek /Theatre 2/ zdařilou round-table discussion, za účasti 21 členů a 4 zahraničních účastníků. Byl diskutován vliv teploty na NMR měření a dále byl posouzen výhledový plán činnosti skupiny.

Program, který bylo možno ovlivnit, byl dobře sestaven a vyvolal změny ho nijak vážně nepoškodily.

Je možno konstatovat, že prakticky každý účastník molekulové sekce se podílel aktivně na jednání konference /přednáškou nebo posterem/.

Jako určitý nedostatek je nutno konstatovat, že i firmy vyrábějící zařízení používané při provozování molekulové spektroskopie, přivezly na výstavu prakticky jen přístroje z jiných oborů. Tento rys však na druhé straně umožnil účastníkům z oborů molekulové spektroskopie seznámit se i s jinými metodikami a jinými typy zařízení. Toto obohacení se projevilo i v možnostech setkání a diskusi s pracovníky ostatních sekcí.

Konference poskytla molekulové spektroskopii adekvátní prostor úměrný zastoupení jednotlivých disciplín na čs. spektroskopických pracovištích. To vyzdvihujeme jako hlavní přínos konference pro molekulovou sekci, tím spíše, že toto není běžné na konferencích podobného typu v zahraničí /např. CSI s výjimkou 20. v Praze/.

C. Sekce speciálních spektroskopických metod

V této sekci, která pod poněkud nejasným názvem zahrnuje moderní spektroskopické metody, kterými lze studovat analytické problémy objemů, povrchů, velmi malých lokalit blízko povrchu, chemickou vazbu a strukturu valenčního pásu, jemnou strukturu absorpčních pásů, strukturu a složení adsorbovaných atomů a molekul, magnetické vlastnosti materiálů a řadu dalších analyticky i technologicky důležitých vlastností, odezněla řada přednášek významných světových i našich odborníků, doplněných množstvím posterů, které dokreslily v řadě případů význam nasazení těchto technik v celé řadě odvětví, která hrají rozhodující roli v soudobé vědě a technice. Svědčí o tom sborník abstrakt, který svým rozsahem a šíří tematiky odpovídá ostatním sborníkům vydaným atomovou a molekulovou sekci Čs. spektroskopické společnosti.

V oblasti rtg spektrální analýzy a rtg mikroanalýzy je v současné době hlavním bodem zájmu zlepšení matematických korekcí při analýze prvků a nasazením nových výpočetních metod, zejména metody Monte Carlo. Účelné využití mikroprocesorů

a minipočítačů, připojených přímo na přístroj, je dnes již běžným požadavkem. Největším přínosem byly přednášky M. Pavlička /ČSSR/, V. D. Afonina /SSSR/, V. D. Scotta a G. Lova /Velká Británie/, A. Kutzumowa /PLR/ a poster J. Paducha a E. Barszcze /PLR/. Praktické využití těchto metod pro tenké polovodičové vrstvy bylo ukázáno na posteru K. Jurka a L. Roskocové /ČSSR/. Ohřev vzorků způsobený dopadajícími elektrony a jeho matematické modelování bylo uvedeno na posteru V. Hulinského, B. Bernauera a J. Nebesářové /ČSSR/. Značná pozornost byla věnována standardům jako základnímu předpokladu kvalitních analýz. Zcela ojedinělá byla přednáška A. I. Kozlenkova /SSSR/ o použití mřížkových spektrometrů v oblasti dlouhovlnného rtg spektra a pro analýzu velmi lehkých prvků. Zde bych chtěl pokračovat ve spolupráci, která by mohla skončit realizací unikátního přístroje pro mikroanalýzu velmi lehkých prvků. Nesporným přínosem byla též přednáška M. Gurkera /Rakousko/ o zobrazovacích technikách pomocí rtg záření, jako je počítačová tomografie, rekonstrukce obrazů z lineárních záznamů, použití kodovaných apertur k zobrazování. Zde jsme viděli nové možnosti a značnou pozornost, která je těmto technikám věnována na Technické universitě ve Vidni /prof. Ebel/ a skvělé vybavení přístrojovou technikou. Výsledky získané těmito technikami mají již dnes nesmírný význam v oblasti lékařské diagnostiky, ale budou jistě rozšířeny do oblasti výzkumu organické i anorganické hmoty, neboť přinášejí neočekávané možnosti zobrazování povrchů, řezů, i nasazení holografických technik pro prostorovou rekonstrukci obrazu.

Pracovníci z oblasti Mössbauerovské mikroskopie si vyměnili zkušenosti z řady domácích i zahraničních pracovišť a především účast prof. Gonsera /NSR/, předního světového odborníka v oblasti Mössbauerovské mikroskopie a struktury látek a jeho přednáška Analýza amorfních slitin, dala vynikající přehled o výzkumu kovových skel a jejich struktury, o studiu počátku krystalizace, o formování různých fází v amorfních látkách a o vlivu magnetických a elektrických polí na tyto jevy. Amorfní kovová skla mají již dnes celou řadu uplatnění jako magneticky měkké materiály, materiály s vysokou pevností a jako supravodiče. Byla dohodnuta spolupráce našich předních odborníků Ing. Sitka, Dr. Zemčika, Dr. Schneeweisse, Ing. Hanouska a Doc. Lipky s Dr. Melzerem /NDR/ o rozvoji Mössbauerovské mikroskopie a další spolupráci.

Skupina instrumentálních radioanalytických metod měla možnost vyslechnout přednášku Doc. Dybczynského /PLR/, která byla věnována postavení a úloze neutronové aktivační analýzy mezi metodami užívanými ke stanovení stopových koncentrací prvků. Z oblasti instrumentálních radioanalytických metod byly ještě předneseny tři přednášky. Prof. Kosta /SFRJ/ přednášel o chemických aspektech analyzovaných materiálů, uplatňujících se v aktivační analýze za užití spektrometrie záření gama. V. Hnatowicz /ČSSR/ podal přehled o metodách využívajících promptního záření, provázejícího interakce urychlených částic se zkoumanými materiály. Na příkladech stanovení prvkového složení tenkých vrstev kysličníku křemičitého a nitridu křemíku, přiblížil metodu zpětného rozptylu částic alfa užitou ke studiu materiá-

Lu z oblasti mikroelektroniky. Přednáška A.Hermann /NDR/ byla věnována užití spektrometrie záření gama ke stanovení stupně vyhoření uranu. Postery byly věnovány převážně neutronové aktivační analýze materiálů minerálního i biologického původu a dále spektrometrii záření gama v oblasti materiálového výzkumu a metalurgie.

Odborného programu hmotnostní spektrometrie se zúčastnilo celkem 27 vědeckých a odborných pracovníků, z toho 8 ze zahraničí /GB, NDR, MLR, PLR/. Tři účastníci ze zahraničí /prof. Beynon, Dr.Dube, Dr.Carter/ byli oficiálními zvanými hosty konference. Byla přednesena jedna plenární přednáška a 4 přednášky vyzvaných odborníků /Dr.Carter, Dr.Dube, Dr.Hanuš a Dr. Hladíková místo nemocného Dr.Buzka/. Přihlášeno bylo 18 posterů, prezentováno jich bylo 16 /z toho 6 zahraničních/. Kromě VŠCHT Praha se v rámci konference na programu skupiny aktivně podíleli zástupci všech předních pracovišť hmotnostní spektrometrie ČSSR /ÚFCHÉ ČSAV, ÚOCHB ČSAV, VÚFB, CHÚ SAV, SVŠT Bratislava, VÚSPL Pardubice a další/. Přednášky a postery měly dobrou odbornou úroveň a navodily řadu podnětných diskusí během celé konference. Velmi cenná byla setkání s předním světovým odborníkem v oboru hmotnostní spektrometrie prof.Beynonem, při nichž bylo konstatováno, že rozvoj hmotnostní spektrometrie je v průběhu několika posledních let rychlejší /díky novým moderním technikám/ než se ještě před 10 lety předpokládalo. S politováním bylo konstatováno, že v zavedení moderních technik a v kvalitě přístrojů ČSSR značně zaostává za celosvětovým průměrem. V současné době není v ČSSR ani jeden hmotnostní spektrometr, který by představoval světovou špičku. Přístroje, které byly v posledních 5 letech zakoupeny a s jejichž zakoupením se počítá v tomto roce, představují svými parametry pouze střední, nikoliv špičkovou kategorii. V diskusích byla podána řada podnětných návrhů k dalšímu zintenzivnění práce skupiny, s jejichž realizací se počítá počínaje rokem 1986.

Pracovníci z oblasti elektronové a iontové spektrometrie si vyslechli vyzvanou přednášku Z.Sidorského /PLR/ na téma Spektroskopie charakteristických ztrát adsorbovaných kovů na kovových podložkách. Metoda spektroskopie charakteristických ztrát umožní lépe poznat procesy adsorpce alkalických kovů a bude moci zřejmě i blíže poznat adsorpci vzácných kovů a vysvětlit některé adsorpční mechanismy. Přednáška L. Eckertové a J.Pavluha /ČSSR/ pojednala o Augerově spektroskopii prahových potenciálů vycházející z bohatých experimentálních zkušeností obou autorů, kteří dosáhli významných výsledků na přístrojích vlastní konstrukce. Postery o využití elektronové a rtg spektroskopie v oblasti kovů byly prezentovány A.Shpakem /SSSR/ a H. de Sas-Stupnickou /PLR/. Použití Augerovy spektroskopie na studium iontů dusíku implantovaných do monokrystalů Fe v závislosti na implantační dávce a následného teplotního zpracování prezentoval J.Zemek a Le van Phac /ČSSR/. Na závěr lze říci, že toto mladé odvětví čs.spektroskopie se slibně rozvíjí, i když množství pracovišť v ČSSR je podmíněno obrovskou cenou těchto přístrojů, kde jsme zatím bohužel odkázáni na kapitalistické státy.

D. Výstava přístrojů a zařízení

Výstava přístrojů byla nedílnou součástí programu konference. Konala se v době od 19. do 21.6. v areálu výstaviště v pavilonu H. Výstavy se zúčastnilo celkem 11 zahraničních vystavovatelů, předních světových výrobců spektroskopických přístrojů a doplňků. Kromě zahraničních vystavovatelů se výstavy zúčastnili někteří čs. výrobci referenčních materiálů a přístrojů.

Ve výstavním pavilonu byla současně uspořádána výstavka vědecko-technické literatury, odborných i dalších materiálů z vydavatelství SNTL, Academia, Veda a Pergamon Press.

Vystavovatelé měli dále možnost prezentace formou přednášek nebo posterů. V průběhu trvání výstavy bylo předneseno 10 příspěvků a 2 postery.

Firma Philips /Holandsko/ vystavovala společně s Pye Unicam a tvořily tak nejrozsáhlejší expozici. Philips předvedl opticko-emisní simultánní spektrometr PV 8020 s computerem HP 85. Mezi přednosti přístroje náleží promyšlený software a jednoduchá konstrukce. Firma Pye Unicam /Anglie/, která je u nás známa především v oboru AAS, předvedla svůj nový PV 9000 System s PV 9007 Data Control Station. Přístroj byl předveden ve spojení s čs.elektrotermickým atomizátorem WETA 82 /výr. Laboratorní přístroje/. Použití atomizátoru WETA s komerčním AAS spektrofotometrem bylo předmětem mnoha diskusí a vzbudilo značný zájem návštěvníků. Baird Europe /Holandsko/ přijel s plazmovým fluorescenčním spektrometrem, dosud jediným komerčně vyráběným přístrojem tohoto typu. Přístroj nabízí široké analytické možnosti v potravinářství, analýze vod, olejů apod. Očekávaný nový mobilní opticko-emisní spektrometr byl v té době na výstavě GIFA a byl představen odborné veřejnosti o týden později v Praze. Perkin-Elmer /Rakousko/ předváděl Zeemanovský AAS spektrometr - model 3030 s autosamplerem. Firma Spectro /Rakousko/ úspěšně zachytila trend mobilních opticko-emisních spektrometrů a předvedla nový model Spectrotest L se vzduchovým buzením. Robustní konstrukce zaručuje vysokou odolnost proti nárazům, rozměrný display a důsledně propracované programové vybavení zvyšuje užité vlastnosti a řadí tento přístroj téměř na úroveň laboratorních kvantometrů. Na místě prokázal na zkušebních vzorcích i své kvality analytické a těšil se značnému zájmu návštěvníků. Nuclear Data /NSR/ předvedla inovovaný model multikanálového analyzátoru akumulovaných spekter jaderného záření ND 76 s barevným obrazovkovým displayem. Oproti předchozímu modelu ND 66 přináší řadu uživatelských výhod a představuje v oboru světovou špičku. Švýcarská firma Varian demonstrovala poslední model UV-VIS spektrofotometru DMS 100 s real time displayem ve spojení s DS 15 Data Station. Bruker /NSR/ vystavoval z řady svých FT-IR spektrometrů vakuový IFS 113 v. V oboru spektrometrie záření gama prezentoval Berthold /Rakousko/ multikanálový /8000/ gama spektrometr Cicero /výrobce Silena Itálie/. Exposice vzbudila velký zájem pracovníků v jaderné energetice. Výstavy se dále zúčastnily

Applied Research Laboratories a Spectronex /Švýcarsko/, pouze však v rámci konzultační a komerční činnosti.

Z čs.výrobců to byly Laboratorní přístroje /WETA 82/ a VŠCHT Praha /Trace Hg Monitor/. Tento přístroj, zatím vyrobený na VŠCHT výhradně z tuzemských součástek, vzbudil zasloužený zájem.

Rozsahem sice nevelká, ale významem a ohlasem překvapila expozice čs.výrobců referenčních materiálů. VÚ ČKD Praha vystavoval kovové RM pro emisní spektrometrii 7oceli, litiny i neželezné kovy, včetně denních nastavovacích vzorků a vzorků pro stanovení vlivu grafitizace litiny/. VZÚ NHKG Ostrava předvedl RM pro analytiku strusek a XRF spektrometrii. VÚ kovů Panenské Břežany nabídl vzorky kovů vysoké čistoty, ÚNS Kutná Hora přispěl vzorky geologických materiálů. ÚRVJT Košice pak doplnil expozici nabídkou RM z analytiky popílků.

Ačkoliv účast zahraničních vystavovatelů byla částečně ovlivněna koincencí s výstavou GIFA /NSR/, lze říci, že účastníci konference měli možnost shlédnout současnou špičkovou přístrojovou techniku různých oborů spektroskopie. Nepříjemným překvapením byl naopak malý zájem čs.výrobců a vystavovatelů ze ZST. Jedinými čestnými zástupci byly Laboratorní přístroje, jejichž WETA ve spojení s AAS systémem Pye Unicam vzbudila zasloužený ohlas, a VŠCHT. Významným kladem byla účast čs.výrobců RM; předváděné materiály vzbudily značný ohlas /především ze strany samotných zahraničních vystavovatelů/. Možnost bezprostředního kontaktu s výrobcí přístrojové techniky se ukázala velmi užitečná a nepochybně by mohla přinést i určitý komerční úspěch.

Výstava byla účastníky konference hodnocena kladně - to ostatně potvrdil i značný zájem. Je možno konstatovat, že výstava přístrojů významně přispěla ke zvýšení odborné i společenské úrovně konference.

Poznámka:

Úplná zpráva o konferenci včetně příloh /zápis ze schůze vedoucích národních delegací zemí RVHP na VIII. CANAS, přehled účastníků podle jednotlivých států a rozpočet/ a přednesených slavnostních projevů je k dispozici v sekretariátu Společnosti. Zájemci si ji mohou vypůjčit prostřednictvím vedoucích svých sekcí.

Udělení plakety Jana Marca Marci za rok 1984

Na návrh předsednictva Hlavního výboru Společnosti udělil Hlavní výbor na své 38. schůzi dne 10.prosince 1984 plakety Jana Marca Marci z Kronlandu RNDr Ivanu Smolerovi, CSC a RNDr Vladimíru Hanušovi, CSC.

Uvádíme stručný výtah z písemného zdůvodnění, které vypracovali Ing. Miloslav Vobecký, CSC a RNDr Miroslav Ryska, CSC.

RNDr IVAN SMOLER, CSC

Dr. Ivan Smoler se narodil 13. března 1901 v Petrohradě, kde vyrůstal a posléze absolvoval gymnasium, je lužickosrbské národnosti. V letech 1922-24 sloužil v Rudé armádě. V roce 1925 odjel do Prahy, kde studoval na přírodovědecké fakultě Karlovy univerzity, studium zakončil disertací z polarografie a až do roku 1935 pracoval u prof. Heyrovského. V letech 1935-1939 působil ve Vojenském technickém a leteckém ústavu, kde se zabýval spektrální analýzou. Během války, tj. v letech 1939-1945, pracoval ve Spolku pro chemickou a hutní výrobu, kde pokračoval v práci ve spektrální analýze. Protože Spolek v té době neměl vlastní spektrální laboratoř, pracoval Dr. Smoler zpočátku v laboratoři doc. J. Šuly v nemocnici na Bulovce. Od roku 1941 až do konce války pracoval v laboratoři v Rybitví. Po válce se vrátil do Vojenského technického ústavu, kde setrval do roku 1951. Odtud se vrátil opět k prof. Heyrovskému, nejprve do Ústředního polarografického ústavu, který byl později převeden do ČSAV. Na tomto pracovišti se zabýval polarografií a působil zde jako vědecký pracovník až do roku 1980.

Dr. I. Smoler je průkopníkem spektrální analýzy, neboť od roku 1935 ji užíval k analýze materiálů nejrůznějšího původu. V laboratoři tehdejšího Vojenského technického a leteckého ústavu v Praze pracoval s přístrojem firmy Zeiss vybaveném skleněnou i křemennou optikou. Vzhledem k charakteru pracoviště nacházíme pouze jednu publikaci z roku 1937 nazvanou Spektroskopické a chemické výzkumy o zlatu v rostlinách, autoři B. Němec, J. Babička, I. Smoler, Rozpravy II. třídy České akademie, ročník XLVII, č.9.

RNDr. VLADIMÍR HANUŠ, CSC.,

absolvent Reálného gymnasia ve Dvoře Králové n/Labem, ukončil dvouletý abiturientský kurs chemie na průmyslové škole v Kolíně. V letech 1946-49 působil jako výpomocný asistent profesorů R.Brđičky a J.Heyrovského na přírodovědecké fakultě University Karlovy v Praze. Zabýval se polarografií, zvláště t.zv. kinetickými proudy. Za tyto práce mu byla udělena stříbrná plaketa J. Heyrovského. V letech 1949-52 jako aspirant fyzikální chemie postavil spolu s V. Čermákem, Č. Jechem a J.Cabicarem hmotnostní spektrometr Nierova typu, první československý hmot-

nostní spektrometr. Za tento významný přínos mu byla v r.1954 udělena státní cena.

Od poloviny padesátých let se soustavně zabývá hmotnostní spektrometrií organických sloučenin, zvláště studiem mechanismů rozpadu ionisovaných molekul, dále pak i analytickými aplikacemi hmotnostní spektrometrie při identifikaci a objasňování struktury organických sloučenin. V poslední době jsou závažné jeho práce při objasňování vlivu stereoelektronických faktorů na mechanismus monomolekulárních rozpadů iontů.

RNDr. V. Hanuš CSc. pracuje jako vědecký pracovník v Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV. Je členem redakční rady mezinárodního časopisu Organic Mass Spectrometry a řady dalších odborných rad. Vychoval řadu mladých vědeckých pracovníků. Publikoval nebo přispíval na 70 původních odborných prací v oboru hmotnostní spektrometrie. Významnou měrou se zasloužil o rozvoj organické hmotnostní spektrometrie nejen v ČSSR, ale i ve světovém měřítku. v ČSSR je právem považován za zakladatele organické hmotnostní spektrometrie.

SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE

Zpráva o Letní škole NMR spektroskopie - 1984

Ve dnech 27.-31.8.1984 uspořádala brněnská pobočka Československé společnosti chemické ve spolupráci s odbornou skupinou Magnetické rezonanční spektroskopie ČSSS a pobočkou ČSVTS o.p. Lachema Brno kurz magnetické rezonanční spektroskopie pro začátečníky nazvaný Letní škola NMR spektroskopie - základní kurz. Kurzu se zúčastnilo 22 posluchačů.

Účastníci kurzu, u nichž nebyly předpokládány žádné znalosti NMR, byli formou přednášek, cvičení a praktického měření u spektrometru Tesla BS 467 a Bruker WP80SY v o.p. Lachema seznámeni se základními technikami zápisu NMR spekter a s postupem při jejich zpracování a vyhodnocování.

Výuku zajišťovali RNDr. Miroslav Holík, CSc. /VÚČCH Lachema Brno/, RNDr. Vladimír Sklenář /ÚPT ČSAV Brno/ a RNDr. Milena Turečková /Tesla k.p. Brno/. Jako studijní materiál pro přednášky a cvičení byla použita skripta Přírodovědecké fakulty UJEP v Brně: M.Holík, Čtyři Lekce z NMR spektroskopie.

V průběhu kurzu odezněly přednášky:

Jádro v magn.poli, vznik CW a FT spektra
Vzhled spektra, počet signálů
Poloha signálů, chem. posun, standardy
Štěpení signálů, interakční konstanta
Relaxace a intenzita signálů, měření T_1
Složky stínící konstanty
Velikost interakční konstanty
Dynamická NMR
Kvantitativní analýza
Metody dvojí rezonance
Pomocná činidla v NMR

Organizace a náplň Letní školy NMR byly přijaty všemi účastníky kladně. V příštím roce se počítá s kurzem pro pokračilé.

25. pracovní schůze OS pevného stavu

se konala dne 26.11.1984 ve Fyzikálním ústavu ČSAV v Praze 6. Těžištěm schůze byla přednáška Ing. Ivo Lukeše "Studium monokrystalického GaAs pomocí plazmové reflexe v infračervené oblasti". Metoda plazmové reflexe je velmi účinná spektroskopická metoda /nedestruktivní, bezkontaktní/, která umožňuje určit efektivní hmotnost a pohyblivost volných nositelů náboje. Vyhodnocení u složitějších struktur, kdy se překládá přes sebe např. spektrum podložky a epitaxní vrstvy a navíc je průběh ovlivněn kmity mříže, je sice náročné, ale možné pomocí matematického modelování na počítači.

V druhé části schůze byly projednány organizační záležitosti odborné skupiny a plán práce na příští rok. Prof. Horák nabídl, že v roce 1985 připraví přednášku o vlastnostech vrstevnatých polovodičů.

Ivo Lukeš, Fyzikální ústav ČSAV, Praha: Studium monokrystalického GaAs pomocí plazmové reflexe v infračervené oblasti.

Metoda měření plazmové reflexe je založena na určení frekvence podélných kmitů, které koná plyn /plazma/ volných nositelů náboje pod vlivem vnějšího elektromagnetického pole. Tyto tzv. plazmové kmity výrazně ovlivňují průběh spektra odrazivosti daného materiálu v blízké a střední infračervené oblasti. Frekvence plazmových kmitů /plazmová frekvence/ je přímo úměrná druhé odmocnině poměru koncentrace a efektivní hmotnosti volných nositelů náboje.

Je-li znám vliv jednotlivých parametrů měřeného systému /plazmové frekvence, tlumení, tloušťka vrstvy apod./ na průběh spektra odrazivosti, je možné určit hodnotu plazmové frekvence z průběhu spektra, a to i v poměrně složitém případě, kdy je průběh ovlivněn kmity mříže a uplatňuje se plazmon-fononová interakce.

K nalezení vlivu jednotlivých parametrů je velmi účelné použít počítačovou simulaci účinků změny parametrů systému na modelová spektra odrazivosti.

Měření plazmové reflexe je nedestruktivní a bezkontaktní metoda, pomocí níž je možné určit poměr koncentrace a efektivní hmotnosti a příp. i pohyblivosti volných nositelů náboje.

Byly uvedeny příklady použití této metody v případě monokrystalického GaAs a epitaxních vrstev GaAlAs na GaAs substrátu.

SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

III. československá konference o jiskrové a sekundárně iontové hmotnostní spektrometrii.

Konference se konala ve spolupráci TESLA-VÚST, TESLA-VÚVET, československé vědeckotechnické společnosti TESLA-VÚST a československé spektroskopické společnosti ve dnech 25.-28.4.1984 na Souši v Jizerských horách. Zúčastnilo se 30 odborníků z MLR, NDR, PLR a ČSSR. Tématem konference byly metodické a přístrojové otázky rozvoje těchto metod a jejich aplikace v materiálovém výzkumu. 7 referátů bylo předneseno z oblasti jiskrové hmotnostní spektrometrie, 10 referátů z oblasti hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů. Ve 4 vyžádaných referátech /dr. Cornides a dr. Opauszky z MLR, dr. Trapp z NDR a dr. Šroubek z ČSSR/ byl zhodnocen současný stav a perspektivy hmotnostní spektrometrie obecně, dále byly pro LMS a SIMS posouzeny další možnosti vývoje a shrnuty dosavadní teoretické znalosti mechanismu ionisace účinkem primárního svazku. Značný prostor byl věnován diskusím jak během konference tak na závěr u kulatého stolu. Konference velmi přispěla k informovanosti účastníků, čímž splnila své poslání. Byla vyslovena shoda názorů v nutnosti pokračovat v konferencích tohoto typu v budoucnosti.

OS lokální mikroanalýzy

Seminář "Vlastnosti mikroanalytického zařízení firmy Philips"

Seminář "Vlastnosti mikroanalytického zařízení firmy Philips" pořádala OS lokální mikroanalýzy ČSSS spolu s Ústavem fyzikální metalurgie ČSAV v Brně, který zabezpečil konání semináře obsahově i organizačně. Seminář se konal 16. a 17. října v ÚFM ČSAV v Brně. První den byli účastníci podrobně seznámeni formou přednášek a diapozitivů s celou mikroanalytickou sestavou tvořenou rastrovacím mikroskopem SEM 505, energiově dispersivním analyzátozem Edax PV 9100/65 a vlnově dispersivním analyzátozem Microspec WDX-2A včetně programovacích systémů EDLSCN, EDAUTO a WEDAX III pro automatickou mikroanalýzu a systémem PARTDT pro obrazovou kvantitativní analýzu počtu a plochy částic. Zástupci firmy Philips, pp. van Wijngaarden a van Ass, seznámili účastníky s novým trendem vývoje zařízení této firmy v oboru rastrovací mikroskopie a mikroanalýzy a s některými aspekty počítačového ovládání uvedených přístrojů. Druhý den semináře bylo zařízení převedeno v jeho základních funkcích po skupinách všem účastníkům semináře. Souběžně s předváděním přístroje probíhala diskuse o vlastnostech zařízení a možnostech jeho využití v různých oblastech studia pevných látek.

Semináře se zúčastnilo 73 pracovníků ze 46 institucí ČSSR, zabývajících se problematikou rastrovací mikroskopie a mikroanalýzy.

OS rtg spektrometrie

24. pracovní schůze se konala dne 13.11.1984 v Brně za účasti 54 členů.

Schůze, kterou řídila Dr. J. Waňková, CSc, byla věnována přístrojové technice firmy ARL a to jejich poslednímu modelu rtg. spektrometru typ 8480, který představuje velice výhodné hybridní řešení mezi dosud používanými simultánními a sekvenčními typy přístrojů. Pracovníci rtg. laboratoře k.p. Sigma ve 3 specializovaných přednáškách a při exkurzi k přístroji seznámili účastníky s technickými parametry, programovým vybavením i ekonomickými otázkami zavedení tohoto přístroje v k.p. Sigma a zodpověděli řadu otázek ve velmi bohaté diskusi. V diskusi vystoupil i zástupce firmy ARL ing. G. Emmerling, který seznámil účastníky především s dalším výrobním programem firmy.

V diskusní části schůze vystoupil ing. Ersepke z NHKG Ostrava a seznámil účastníky schůze s nabídkou bulharské AV na předání "Know-How" na tavení vzorků bez potřeby platiny. Zpráva vzbudila velký zájem, ale i skepsi. Další jednání s bulharskou AV povede VU NHKG; případní další zájemci, kteří

by se chtěli podílet na nákladech na tuto licenci, ať se obrátí přímo na VU NHKG.

Dále vystoupil ing. Jarov s propagací požadavku na výrobu čsl. rtg. spektrometru založeného na patentu ing. Vopařila. Podklady byly předány k posouzení přístrojové komisi ČSSS.

Dále přinášíme resumé hlavních přednášek.

St. P a v l á s e k , k.p. Sigma Slatina, Brno: Rentgenfluorescenční automatický spektrometr XRF 8480 fy ARL

V přednášce byli účastníci seznámeni s výrobním programem k.p. Sigma Slatina a s funkcí podnikových laboratoří se zvláštním zřetelem na budování systému řízení technologických procesů výroby tekuté oceli. Tento systém se postupně buduje v laboratořích.

Dále byl stručně popsán realizovaný a plně využívaný systém sběru dat /informací/ a jejich zpracování. Účastníci byli stručně informováni o výstupech tohoto systému a jejich praktickém využití v oblasti kontroly dodržování předepsané technologie a ekonomiky provozu ocelárny.

Stručně byly uvedeny důvody, které byly rozhodující při výběru z nabídek Philips, Siemens, ARL.

Bylo konstatováno, že pro střední ocelárny je velmi výhodný simultánně-sekvenční přístroj, který rychlostí pro základní prvky /simultánní způsob - 8 kanálů/ je shodný se simultánními přístroji přičemž je zachována možnost stanovit ostatní prvky sekvenčně.

Podrobněji byl proveden rozbor ekonomické návratnosti investičních prostředků, způsob sledování a vyhodnocování. Dle dosavadních výsledků bude návratnost kratší jak 3,5 roku.

D. M a k o v s k ý , k.p. Sigma Slatina, Brno: Technické parametry rtg. kvantometru XRF 8480 firmy ARL.

V úvodu přednášky byly uvedeny výhody kvantometru XRF 8480 proti nabídkám jiných konkurenčních firem a seznámení s prozatímním analytickým programem, se kterým se na kvantometru pracuje.

Další část přednášky obsahovala podrobný popis přístroje, zejména jeho tří hlavních částí:

- Budící část - popis rentgenky a jejího primárního a sekundárního chladicího okruhu
- Spektrometr - seznámení s pěti modifikacemi přístroje, popis goniometru, jeho uspořádání a tech. parametry, zařízení pro zacházení se vzorkem, popis čtyř různých druhů měření, informace o synoptickém panelu a stinitku informačního zobrazovače.

Elektr.část - ACS-analytický výpočetní systém /počítač PDP 11/03 a disková jednotka/
ICS - řídicí systém přístroje
XQB - hlavní mikropočítač přístroje
XGC - mikropočítač pro goniometr
XQC - mikropočítač pro spektrometr

Na závěr přednášky bylo vyhodnoceno dlouhodobé sledování stability přístroje a sledování vlivu přebušování vzorku na změnu chem. složení.

V. C h a d z i v a s i l i s , k.p. Sigma Slatina, Brno:
Rentgenfluorescenční kvantometr XRF 8480 firmy BAUSCH & LOMB - ARL . Programové vybavení.

V úvodu byli přítomni seznámeni s některými pojmy "počítačové" terminologie a dále s hlavními technickými parametry počítače PDP 11/03 firmy DEC, videoterminálem VT100 a kombinovanou vnější záznamovou jednotkou tvořenou floppy diskem a pevným Winchester diskem.

Hlavní část přednášky se týkala systému SAS/DPS Verze 3.5, který je dodáván výrobcem pro řízení kvantometru a zpracování naměřených hodnot intenzit. Popis programu SAS/DPS byl rozdělen takto:

- popis souborů potřebných pro alespoň minimální funkci programu, tj. možnost naměřit intenzity referenčních vzorků
- popis souborů potřebných pro chod goniometru
- popis funkce programu pro vícenásobnou regresi a práce s ním

Na závěr byly krátce zhodnoceny výhody a nevýhody programu SAS/DPS a byla provedena praktická ukáзка přístroje v běžném provozu.

OS hmotnostní spektrometrie

15. pracovní schůze se konala ve spolupráci s Ústavem fyzikální chemie a elektrochemie J.H. ČSAV v Praze ve Výzkumném ústavu pro farmaci a biochemii dne 28.11.1984 za účasti 16 členů OS hmotnostní spektrometrie. Na programu byla přednáška prof. A. Maccolla z University College London na téma "Novel ions as revealed by low energy mass spectra".

V přednášce ilustroval prof. A. Maccoll na příkladech alifatických alkoholů, aminů, aldehydů a dalších organických sloučenin vznik řady neobvyklých iontů při ionisaci elektro-

ny o energii blízké ionizačnímu potenciálu molekul a při nízkých teplotách iontového zdroje /70 °C/. Struktury byly doloženy hodnotami získaných vnitřních energií iontů. Přednáška byla doprovázena dlouhotrvající diskusí.

OS elektronové a iontové spektroskopie

8. pracovní schůze za řízení doc. Eckertové se konala dne 28.11.1984 na MFF KU v Praze. Hlavním tématem schůze, již se zúčastnilo 20 členů OS, byla přednáška Prof. Dr. T. Lewowského /Univ. Wrocław/: "Attenuation length determination by photoelectron spectroscopy", jejíž resumé dále uvádíme:

Doběh excitovaných elektronů v pevných látkách bývá určován na základě absorpčního zákona. Vzhledem k tomu, že tento doběh závisí na energii elektronů, nedávají měření užívající elektronů s určitým energetickým rozdělením správné výsledky.

Pro elektrony excitované světlem byly energie analyzovány analyzátozem a měření doběhu provedena pouze pro elektrony s maximální energií. V tomto případě jsou výsledky reprodokovatelné a odpovídají teoretickým představám.

OS instrumentálních radioanalytických metod

Seminář o instrumentální aktivační analýze IAA 84 uspořádala OS instrumentálních radioanalytických metod ve spolupráci s Čs. komisí pro atomovou energii ve dnech 29.10. - 1.11.1984 v Klučenicích. Semináře se zúčastnilo celkem 41 pracovníků v oboru. Pro účastníky semináře byly vydány Souhrny referátů IAA 84; zájemci o tuto publikaci /30 stran/ se mohou přihlásit v sekretariátu Společnosti. Dále uvádíme seznam přednesených příspěvků a resumé přednášky J. Kučery "Použití radioanalytických metod v pracovním lékařství", jejíž resumé nebylo do publikace zahrnuto.

R.Bajer, R.Džmurán, V.Hnatowicz, J.Kvítek, F.Nový, I.Obrusník, M.Vidra, V.Odžajev : "Analýza látek metodami RBS a PIXE"

M.Vobecký: "Interference v INAA"

I.Obrusník: "K problematice použití referenčního aerosolu při kontrole kvality výsledků INAA"

J.Kučera, L.Soukal, J.Faltejsek: "Stanovení nízkých koncentrací manganu v biologických referenčních materiálech neutronovou aktivační analýzou"

J. Paukert, V. L. Růžička, I. Obrusník: "INAA pávoků z okolí Mostu a Třeboně"

V. Jiránek, D. Tlučoň: "Zhodnocení studia mineralizací biologických materiálů"

M. Šimková, J. Kučera: "K problematice stanovení wolframu v biologických materiálech neutronovou aktivační analýzou"

J. Kvičala, J. Havelka, S. Röhling, S. Váňa: "Využití INAA při hledání rozdílů obsahu stopových prvků v séru a vlasech pracovníků dvou závodů automobilového průmyslu"

Z. Řanda: "Vývoj a využití aktivačních metod v posledních letech v radiochemické laboratoři Ústavu nerostných surovin"

J. Mayer, J. Hons, L. Mrázek: "Sledování chemického víkování ingotů pomocí radioaktivních indikátorů"

J. Benada: "Radionuklidová rentgenfluorescenční analýza nerostných materiálů metodou základních fyzikálních parametrů"

J. Bartošek, J. Mašek: "Laboratorní scintilační gama-spektrometr"

J. John, F. Šebesta, V. Spěváčková, J. Sedláček: "Zařízení pro kontinuální měření koncentrace uranu v roztocích pomocí měření absorpce měkkého záření gama"

G. Bešeová, M. Chudý, V. Pokorný: "Piková účinnost koaxiálního Ge/Li/ detektora pro velkoobjemové vzorky"

P. Dryák, P. Kovář: "Detekční limity dosahované různými vyhledávacími procedurami"

J. Hůlka, P. Kuča, I. Malátová, P. Rulík: "Doplňky k programovému vybavení systému Jupiter"

J. Staniček: "Využití nízkopozadových tieniacích krytů na radionuklidovou analýzu"

J. K u č e r a, Ústav jaderného výzkumu, Řež u Prahy: "Použití radioanalytických metod v pracovním lékařství - informace o výzkumném programu koordinovaném mezinárodní agenturou pro atomovou energii /MAAE/"

Cílem výzkumného programu je ukázat přednosti radioanalytických metod a podnítit a zvýšit zájem o jejich použití v pracovním lékařství. Další záměry sledují zvyšování kvality analytických výsledků srovnáním s rutinně používanými analytickými metodami a posílení kontaktů mezi laboratořemi a ústavu zabývajícími se problematikou radioanalytických metod a pracovního lékařství.

Jako hlavní oblasti použití jsou stanoveny:

- studium interakce /příjem, distribuce, vylučování/ toxických látek či prvků nacházených v pracovním prostředí s organismy pracovníků nebo experimentálních zvířat

- studium korelací mezi koncentracemi toxických látek v terčových orgánech a tzv. indikátorových tkáních /vlasy, krev, moč/

- studium korelací mezi výsledky monitorování pracovního prostředí a biologickými parametry

- separace a stanovení biologicky aktivních komponent kontaminujících pracovní prostředí

- studium velikosti, tvaru a morfologie částic kontaminujících pracovní prostředí a vliv těchto parametrů na biologickou aktivitu kontaminantů

- vývoj metod osobního monitorování pracovníků včetně "in-vivo" technik.

Hlavními používanými radioanalytickými metodami jsou neutronová aktivační analýza a rengenfluorescenční analýza s buzením radionuklidovými zdroji i nabitými částicemi /PIXE/. Výzkumného programu se účastní 13 laboratoří z různých zemí Evropy, Asie, Ameriky a Austrálie, které jsou členskými státy MAAE. Československo je zastoupeno programem "Stanovení kadmia a zinku v biologických a ekologických vzorcích neutronovou aktivační analýzou ve vztahu k průmyslovým exhalacím", který je řešen v Ústavu jaderného výzkumu ve spolupráci s několika zdravotnickými institucemi.

ZPRÁVY

Symposium o aktuálních problémech ve spektroskopii

Ve dnech 18.-22. června 1984 se konala v Moskvě I. Symposium o aktuálních problémech ve spektroskopii, které uspořádala Vědecká rada Akademie Věd SSSR ve spolupráci s Ústavem spektroskopie AV SSSR. Symposia se zúčastnili delegáti BLR, NDR, PLR, SSSR a ČSSR. Pro jednání bylo stanoveno poměrně široké téma "Spektroskopie atomů a molekul".

K uvedenému tématu bylo předneseno celkem 59 příspěvků zaměřených na aktuální problematiku atomové a molekulové spektroskopie, laserové spektroskopie a spektroskopie pevného stavu a na využití těchto disciplín v národním hospodářství. Symposium mělo také za úkol rozšířit podmínky pro spolupráci socialistických zemí v dané oblasti a prohloubit již existující spolupráci mezi jednotlivými zeměmi. Bylo zdůrazněno, že dosavadní dvoustranné spolupráce bude nutné rozšířit na mnohostranné, jak to vyžaduje vývoj vědeckých disciplín.

Účastníci symposia přijali návrh vypracovaný na poradě tajemníků sekci fyzikálních věd AV socialistických zemí /Moskva, duben 1984/ a v jeho duchu se usnesli:

- 1/ podpořit iniciativu Vědecké rady pro spektroskopii AV SSSR k pravidelnému pořádání Symposií o aktuálních problémech ve spektroskopii s cílem koordinovat plány vědeckého výzkumu a rozvíjet mnohostrannou spolupráci
- 2/ požádat Akademii věd MLR o uspořádání II. Symposia v květnu/červnu 1985 /příp. 1986/ s předpokládanou účastí 10-12 odborníků z každé země
- 3/ požádat vědecké rady a komise pro spektroskopii akademií věd socialistických zemí o vypracování návrhů pro organizační a vědecké zajištění spolupráce v oblasti optických metod pro XII. pětiletku do 15.12.1984 /návrhy zaslat Vědecké radě pro spektroskopii AV SSSR/.

Úkolem II. Symposia by mělo být i vypracování jednotného programu spolupráce.

Účastníci Symposia byli dále informováni o možnosti využití unikátního instrumentálního vybavení pro spektrální analýzu s vysokým spektrálním a časovým rozlišením, které je podle plánu RVHP k dispozici jak pro spolupráce dvoustranného či mnohostranného charakteru, tak i pro využití jednotlivými akademii věd.

Jaromír M o r a v e c , Ústav jaderného výzkumu, Řež,
Bohuslav S t r a u c h , Přírodovědecká fakulta UK, Praha :
2nd Advanced Seminar on Infrared and Raman Spectroscopy

Ve dnech 26. až 30. listopadu 1984 byl na Technische Universität Dresden (Sektion Chemie, pracoviště prof. E. Stegera) uspořádán 2. seminář o infračervené a Ramanově spektroskopii pro pokročilé.

Na semináři bylo 60 účastníků z 10 zemí (NDR, ČSSR, PLR, Kuba, NSR, SSSR, MLR, RSR, BLR a Indie). Bylo předneseno celkem 23 čtyřicetiminutových přednášek a vystaveno také 7 vývěskových sdělení (posterů). Významnou a cennou součástí semináře byly praktické demonstrace ve spektrálních laboratorích, při nichž bylo možno seznámit se s novými přístroji, vyráběnými v NDR zejména firmou VEB C. Zeiss, Jena. V experimentu a interpretaci byly akcentovány různé číslicové způsoby zpracování spektrálních dat. Vedle IČ interferometru s Fourierovou transformací z dílen AdW DDR a dalších digitalizovaných aparatur drážďanské laboratoře se největší pozornosti těšil nový infračervený spektrofotometr SPECORD M 80 (C. Zeiss, Jena), řízený mikroprocesorem. Jeho cena se základním a některým speciálním příslušenstvím byla námi odhadována na 400 000 Kčs. K přístroji se nabízí poměrně rozsáhlé doplňky. Spektrometr je vybaven pamětí pro dvě spektra, má rozsah 4000 - 200 cm⁻¹ a maximální rozlišení 0,5 cm⁻¹ při

1200 cm⁻¹. Monochromátor má 3 mřížky a 5 filtrů, zdroj je z NiCr a jako detektor slouží termočlánek s CsJ čočkou, na displeji lze průběžně sledovat vlnočty, transmittanci resp. absorbanci, tiskárna má alfanumerický záznam. Hmotnost přístroje je 160 kg, maximální spotřeba energie 0,75 kVA. Bližší údaje o tomto spektrometru, jakož i o UV/VIS Specord M 40 uvádí časopis Jenaer Rundschau č. 4, str. 161 a násl. (1984).

Z IČ spektroskopie odezněly přednášky na témata : vibrační spektra molekulárních krystalů, FTIR a její možnosti a přednosti, blízká IČ oblast a její využití v analýze, harmonické a kombinační pásy skupin obsahujících CH, Fermiho resonance v roztocích, časově závislé procesy a FTIR spektroskopie, IČ elipsometrie, srovnání změřených spekter s údaji získanými kvantově-chemickými výpočty, optoakustická laserová IČ spektroskopie směsí plynů a další. Z Ramanovy spektroskopie byla věnována pozornost zpracování dat, aplikací Ramanovy spektroskopie s totální reflexí, za vysokých tlaků a teplot a další.

Z čs. zástupců přednášeli J. Moravec (použití IČ spektroskopie v jaderném výzkumu) a B. Strauch (o teorii a aplikaci rezonančního Ramanova rozptylu).

Postery se zabývaly např. adsorpcí $\text{Ni}(\text{CO})_4$ na zeolitu, IČ spektra diazinů v závislosti na pH, spektroskopii časového rozlišení atd.

V Ramanově spektroskopii byly prakticky demonstrovány metody studia tvaru pásů jednoduchých kapalin a povrchově zesílený Ramanův rozptyl (SERS).

Z průběhu semináře m. j. vyplynulo, že předmětem jednání nebyly jen otázky základního výzkumu, ale zejména díky moderním postupům, přístrojové technice a digitalizaci získává stále větší prostor i oblast aplikační a že vibrační spektroskopie se stává významnou analytickou, mnohdy nezastupitelnou, metodou.

E r r a t u m

V Bulletinu č. 42/1984 na str. 8 došlo k záměně autora u příspěvku "Přístroje pro rtg fluorescenční analýzu fy ARL", předneseném na 14. pracovní schůzi odborné skupiny automatické spektrometrie v hutnictví Ing. Petrem Kolečkářem z VZÚ NHKG Ostrava. Autorem příspěvku je Ing. Miloslav P r ů š a , Poldi SONP Kladno, který se uvedené schůze nemohl zúčastnit a poskytl svůj příspěvek organizátorovi schůze k prezentaci.

Redakce Bulletinu se omlouvá autorovi i čtenářům a současně žádá organizátory vědeckých setkání, aby u přednesených příspěvků neopomíjeli uvádět i spoluautory, nikoliv pouze jméno přednášejícího, případně uváděli, že se jedná o zástup při prezentaci příspěvku.

Žádáme všechny členy Společnosti, kteří dosud nevrátili vyplněný dotazník pro aktualizaci členské kartotéky, aby tak učinili co nejdříve. (Nezapomente na údaj, v které odborné skupině chcete pracovat !)

Členové ČSSS mohou využívat odborné inzerce v Bulletinu (nabídka/poptávka přístrojů a vybavení, speciální chemikálie, standardy, referenční materiály, služby a kontakty ke spolupráci apod.). Stručný text zašlete na adresu sekretariátu ČSSS (160 00 Praha 6, Kozlovská 1) s poznámkou "pro Bulletin".

Vydává Československá spektroskopická společnost při ČSAV

adresa sekretariátu : 160 00 Praha 6, Kozlovská 1

za ČSSS zodpovídá Dr. M. Fara, CSc

Redakce M. Večerková. Redakční uzávěrka leden 1985

Pouze pro vnitřní potřebu.