

Československá spektroskopická společnost

# Bulletin

58

1989

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

Číslo 58

září 1989

Z obsahu 58. čísla Bulletinu :	str.
Zprávy ze Společnosti	2
Sekce optické atomové spektroskopie : 11.seminář (Šírava 15.-19.5.1989)	4
Konference Hutní analytika '89	5
Sekce molekulové spektroskopie : X.konference IČ spektroskopie s vysokým rozlišením	7
OS vibrační spektroskopie Kurs měření vibračních spekter	10
Chemie v mezihvězdném prostoru (E.Herbst)	20
OS spektroskopie pevného stavu přednáška Taizo Sasaki (Tsukuba, Japan)	21
přednáška I.Ivanov-Omský (Leningrad, SU)	21
OS elektronové spektroskopie a fotochemie Nová organická barviva s hlubokými odstíny	22
Elektronová spektra azobarviv (J.Fabian, TU Drážďany)	22
Sekce speciálních spektroskopických metod :	
OS instrumentálních radioanalytických metod Konference IAA 89	23
OS rtg spektrální analýzy Kurs rtg spektrometrie	24
OS Mössbauerovy spektroskopie seminář "Aplikace Mössbauerovy spektroskopie při sledování vlastností materiálů perspektivních pro praxi"	24
Komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí 6.seminář (Jablonec n.Nisou 5. - 9.6.1989)	30
Soutěže Čs.spektroskopické společnosti	31
Výzva k účasti na mezilaboratorních analýzách RM	33
Informace Nabídky - poptávky	34
Připravované konference	35

## ZPRÁVY ZE SPOLEČNOSTI

Předsednictvo hlavního výboru Společnosti se v době od ledna do září 1989 sešlo na 10 pravidelných schůzích, na nichž byla vedle běžné agendy projednávána realizace tématického zájezdu na XXVI. CSI do Sofie a účast členů Společnosti na konferenci EUCMOS v Drážďanech, byl projednán návrh Ing. Vobeckého na spolupráci s universitou v Taškentu a pro ČSMÚ v Bratislavě bylo vypracováno stanovisko k návrhu norem PNÚ 4222.1-2 "Atomové absorpcné spektrometre. Metrologické požiadavky." Akademiku Vlčkovi byla předána zpráva prognostické skupiny Společnosti "Spektroskopie a spektrální analýza v mikroelektronice a příbuzných oborech". Z důvodu dlouhodobého pobytu Ing. Vobeckého v SSSR byl vedením odborné skupiny instrumentálních radioanalytických metod pověřen Ing. Ivan Obrusník, CSc. K 40. výročí čs. organizované spektroskopie byl připraven článek pro Bulletin ČSAV (Mráz, Vobecký, Fara). Vzhledem k tomu, že Dr. Sychra požádal předsednictvo hlavního výboru o uvolnění z funkce ze služebních důvodů, bylo nově ustanovenno podpisové právo pro hospodaření s prostředky Společnosti na Dr. Rysku a Ing. Volkou; do konce volebního období bude zastupovat Dr. Sychru ve vedení atomové sekce Dr. Josef Musil. Předsednictvo se dále zabývalo přípravou 47. schůze hlavního výboru Společnosti a rozpočtem na rok 1990. Nadále nebude možné hradit schodky v rozpočtu jednotlivých akcí z prostředků Společnosti. Každá vícenenní akce musí mít finanční plán předem schválený předsednictvem. Rozsah Bulletinu bude třeba přizpůsobit rozpočtu a rozsáhlejší příspěvky bude možné publikovat v účelových nákladech.

Dne 12. června 1989 se na VŠCHT v Praze konala 47. schůze hlavního výboru Společnosti. Schůzi řídil předseda Společnosti Dr. Jan Mráz, který v úvodu předal spolu s Ing. Zdeňkem Kosinou ceny vítězů soutěže mladých spektroskopiků a soutěže o nejúspěšnější aplikaci spektroskopických metod při snižování energetické a materiálové náročnosti (rozhodnutí o udělení cen Dr. Lukešovi, Ing. Miglierinimu, Ing. Kvítkoví a Dr. Korečkové viz Bull. 56/1988, str. 2).

Hlavní výbor se zabýval přípravou volebního shromáždění Společnosti, které se uskuteční v prosinci 1989. Pověřil předsednictvo přípravou voleb a doplnil připravenou kandidátku o další kandidáty na funkce v hlavním výboru Společnosti.

Doc. Ksandr upozornil, že na rok 1990 se počítá s úhradou nákladů z rozpočtu Společnosti pouze pro jednoho zahraničního pozvaného přednášejícího pro každou sekci. Další pozvání je třeba uhradit z rozpočtu jednotlivých akcí.

Ing. Kosina informoval podrobně o stavu hospodaření Společnosti a předložil návrh rozpočtu na rok 1990. Upozornil, že nadále nebude možné krýt finanční schodky jednotlivých akcí z rozpočtu Společnosti a navrhl opatření k dosažení vyrovnané bilance. Zdůraznil nutnost osobní odpovědnosti za ztrátovost akcí.

Dr. Ryska informoval o rozhodnutí Kolegia předsedy ČSAV o zřízení Komise vědeckého sekretáře ČSAV pro spektroskopii, jejíž činnost z valné části naplňuje Společnost.

Předsedou komise je Dr. Herman.

Ing. Püschel přednesl zprávu o semináři, který uspořádala Komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí. Vedoucí odborných skupin upozorní své členy na možnosti spolupráce s touto komisí, která je průřezovou ve Společnosti.

Před uzávěrkou tohoto čísla jsme se dozvěděli, že 16. května tr. se konalo rozloučení s Ing. Jánem Luštíkem, CSc, který zemřel po těžké nemoci ve věku 40 let.

Ing. Ján Luštík byl členem odborné skupiny lokální elektro-nové mikroanalýzy a svými odbornými a vědeckými pracemi významně přispěl k rozvoji této speciální spektroskopické disciplíny. Čest jeho památce.

## SEKCE OPTICKÉ ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE

11. Pracovní seminář o využití atomové spektroskopie ve výzkumu a výrobě (Šírava 15. - 19.5.1989)

Seminář, jehož se zúčastnilo 118 pracovníků, byl první větší akcí tohoto typu, pořádanou v rámci integrované sekce atomové spektroskopie. Tato okolnost - a zejména novost vzniklé situace - se projevila prakticky ve všech aspektech přípravy i průběhu akce.

Skladbu prezentovaných příspěvků lze pokládat za vyrovnanou. Projevila se nižší výzkumná aktivita v AAS, naproti tomu významně narůstá zastoupení ICP-OES, a to vcelku vyrovnaně v aplikacích i v obecnějších příspěvcích. Slabší zastoupení analýzy kovů a automatické spektrometrie obecně souvisí patrně s konáním akce těsně po konferenci o hutní analytice.

Bylo by účelné zařazovat do těchto seminářů vždy 1 - 2 přednášky referátového charakteru, které by kvalifikovaně charakterizovaly stav vybraných úseků problematiky a perspektivy dalšího vývoje.

Po organizační stránce bylo dobře zajištěno ubytování a stravování. Nedostatky se projevovaly v sestavení a dodržování vědeckého programu semináře: chyběla logická skladba bloků i návaznost referátů na plenární přednášky. Bude třeba pečovat o lepší účastnickou kázení autorů.

Zahraniční hosté přispěli vesměs kvalitními přednáškami.

Celý průběh semináře ukazuje, že v rámci integrované sekce vzniká více prostoru a příležitostí k vzájemné výměně přístupů, názorů a zkušeností, takže v tomto smyslu se vyplatí úsilí, nutné k překonávání některých komunikačních bariér.

RNDr. Josef Musil

### Zpráva o průběhu konference "Hutní analytika 89"

Konference, pořádaná pracovní skupinou metalurgická analytika SPCH ČSVTS ve spolupráci s Čs.spektroskopickou společností, proběhla ve dnech 25.-27.4.1989 v rekreačním středisku Třineckých železáren "Řeka". Konference se zúčastnilo celkem 185 účastníků z 93 československých i zahraničních pracovišť. Vedle zástupců většiny čs.hutních a strojírenských analytických laboratoří, státních výzkumných ústavů, ústavů ČSAV a SAV a VŠ se akce zúčastnili rovněž zástupci firem ARL, Philips, LECO, pracovníci IMŽ Gliwice (prof.Jurczyk, Dr.Springer), pracovníci závodu Eisenhüttenstadt (Dr.Schneider, Dr.Güldner) a pracovník LKM Miskolc (Dr.Paksy).

Program konference byl jako každoročně zaměřen na prezentaci nových poznatků v oblasti analytiky kovových a nekovových materiálů, nových analytických metod a postupů, praktických zkušeností s novou přístrojovou technikou atd. Projednány byly rovněž závěry z I.čs.konference Základní problémy čs.analytiky, konané v listopadu 1988, výsledky prvního kola hodnocení úrovně práce čs.hutních a strojírenských laboratoří (výsledky kontrolních analýz zadaných vzorků) a další aktuální otázky. Pozornost byla věnována rovněž současnému stavu a perspektivám tvorby referenčních materiálů v ČSSR. Předneseno bylo celkem 35 referátů, vystaveno bylo 20 vývěskových sdělení.

Ve spolupráci s ČSSS byl organizován především druhý den konference, věnovaný již tradičně spektrometrickým technikám v hutnictví a strojírenství. V tomto směru bylo předneseno celkem 15 referátů a prezentováno 10 posterů. Část referátů představovaly náměty, informující o možnostech využití některých typů optických emisních a rtg. fluorescenčních spektrometrů pro řešení různých standardních analytických problémů. Představen byl rovněž velký mikroanalytický systém EDAX 9900, instalovaný před krátkou dobou ve VZÚ NHKG Ostrava (O.Blahož), i nové možnosti VÚ Panenské Břežany v oblasti stopové analýzy kovů, dané získáním hmotnostního spektrometru s doutnavým výbojem a další unikátní přístrojové techniky (A.Vidmar).

Vynikajícím a netradičně prezentovaným byl příspěvek, věnovaný otázkám faktorové analýzy ve spektroskopii (J.Fiala - ŠKODA Plzeň), přínosem byly i referáty ze sféry statistiky a správnosti spektrometrické analýzy (J.Jurczyk, J.Springer a kol.). Pozornost byla rovněž věnována možnostem využití doutnavého výboje v kombinaci s optickou emisní spektrometrií jako velmi účinného nástroje pro analýzu tenkých vrstev (Z.Weiss - ŠKODA Plzeň). Velmi závažným referátem pak byly zpracované výsledky průzkumové akce, hodnotící stav spektrometrických laboratoří v ČSSR (V.Chlan - ŠKODA Plzeň); výsledky by mely pro ČSSS představovat kvalifikovaný výchozí materiál o realitě, možnostech, potřebách a perspektivách aplikované OES a XRF v oblasti čs.hutnictví a strojírenství.

Významným přínosem pro konferenci - zejména její spektrometrickou část - byly příspěvky specialistů nosných přístrojových firem ARL, Philips a LECO. Ze strany ARL byl podán detailní popis současné nabídky přístrojové techniky firmy v oboru OES i XRF. In natura byl přitom demonstrován zcela nový malý přenosný optický spektrometr, vhodný pro různé spektrometrické analýzy v terénu (20 kg hmotnost, slušné analytické parametry). Obdobná informace, shrnující současný sortiment spektrometrů,

byla podána rovněž firmou Philips. Bylo přitom možné konstatovat, že vedle tradičně vysoké úrovni rtg. fluorescenčních spektrometrů udělala firma řadu účinných kroků i pro podstatné zvýšení technických párametrů a celkové úrovni emisních spektrometrů. O významném rozšíření dosavadního sortimentu vyráběných analytických přístrojů pak informoval zástupce firmy LECO.

Připojením dosavadní firmy SPECTRUMA k firmě LECO v roce 1988 byl dán prostor pro vývoj a výrobu optických spektrometrů s doutnavým výbojem a první zkušenosti i zájem o tento typ spektrometrů ve světě dokladují perspektivnost tohoto postupu. Vedle možností standardní "bulk" analýzy má v GDOS analytika k dispozici vynikající techniku pro snímání koncentračních profilů na úrovni vrstev o reálných tloušťkách  $10^{-2}$  -  $10^2$  µm (tedy doplněk již klasických povrchových technik). Vezmemeli v úvahu i nový model ICP-spektrometru LECO s tzv. rychlým čtením, je zcela zřejmé, že s firmou LECO je nutné již v současné době počítat i ve sféře výroby spektrometrických přístrojů.

Po organizační a programové stránce byla konference dobře připravena a zajištěna. Jako těžko řešitelný problém se však ukázal stále rostoucí zájem o účast na akci, vedoucí k obtížím s ubytováním a stravováním účastníků, ale také k nižší disciplině oproti předchozím letům. Vyřešení způsobu příjmu a regulace přihlášek na akce navazující je proto jedním z úkolů pro pořadatele. Příští konference "Hutní analytika 90", v pořadí již desátá, proběhne poslední týden v dubnu 1990 ve spolupráci se ZP ČSVTS VSŽ Košice.

Ing. Zdeněk Čížek

**40**

ČTYŘICET LET  
ČESkoslovenské  
ORGANIZOVANÉ  
SPEKTROSKOPIE  
1949 - 1989

## SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE

X. mezinárodní konference infračervené spektroskopie s vysokým rozlišením

Počátkem září 1988 se na zámku ČSAV v Liblicích u Mělníka konala již X. konference infračervené spektroskopie s vysokým rozlišením. Pravidelným pořadatelem tohoto pětidenního, na první pohled vysoko specializovaného setkání je pracovní skupina molekulové spektroskopie Ústavu fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského v čele s předsedou konference doc. D. Papouškem, DrSc. Podobně jako při předchozích konferencích, jichž jsem se zúčastnil, převažovala ve srovnání s hrstkou československých pracovníků zdatná skupina molekulových spektroskopistů ze zahraničí, z nichž mnozí mají v oboru vysoký kurs. Tedy setkání mezinárodní a špičkové úrovňě.

Sala terrena v přízemí zámku posloužila 44 nejvýše půlhodinovým přednáškám, jež byly po celou dobu pilně navštěvovány. Ve slavnostním sále bylo postupně vyvěšeno na 80 sdělení (posterů).

Obsah konference se podařilo uspořádat do určitých programových okruhů.

První den ukázal širokou paletu problematiky spektroskopie vysokého rozlišení jak v experimentu, tak teorii, potom následoval soubor teoretických přednášek o spektrech molekul, experimenty a nové techniky, fyzika a chemie někdy méně obvyklých částic, zpracování informace od intensit až po databáze spekter vysokého rozlišení, přednášky s aplikacemi výstupy v ochraně životního prostředí, meteorologii, fyzice atmosféry a stratosféry, astrofyzice a kosmochemii.

Z programu přednášek uvádím:

J.T. Hougen (NBS, USA) - použití permutačně inversních grup na některé vícerozměrné problémy malých tunelujících molekul s vysokou amplitudou vnitřních pohybů (stálých molekul, např.  $\text{CH}_3\cdot\text{CH}_3$ ,  $\text{NH}_2\cdot\text{NH}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_2$ ; van der Waalsových molekul a komplexů s vodíkovými vazbami).

T.Oka (Chicago, USA) - IČ spektroskopie molekulárních iontů pomocí IČ laditelných laserů s rozlišením až  $10^{-10}$  (v ohoru komet zjištěny ionty  $H_2^+$ ,  $H_3^+$ , v slunečním záření  $H^-$  a  $H_2^-$ , dále ionty  $NH^+$ ,  $NH_2^+$ ,  $NH_3^+$ ,  $NH_4^+$ ,  $NH^-$ ,  $NH_2^-$ ,  $OH^+$ ,  $OH^-$ ,  $CH_3^+$  apod.)

J.-M. Flaud (Lab.molekulové a atmosférové fyziky, Paříž, Francie) - molekulová spektroskopie vysokého rozlišení a fyzika atmosféry (dálková měření teploty a výškových koncentračních profilů do 30 km z emise, difuze resp. absorpce atmosféry, např. oxidu dusíku, ozonová vrstva).

P.Jensen (Giessen, NSR) - variační výpočty rotačně vibračních energií tříatomových molekul.

G.Winnewisser (Köln/Rh., NSR) - spektroskopie vysokého rozlišení a vznik hvězd (CO v galaxii, mezihvězdné molekulové oblaky-velikost, hustota, dynamika a tvorba hvězd, vývoj hvězd - složení a chemie, oblast Persea, Vozky).

H.Dreizler (Kiel, NSR) - pokroky v mikrovlnné spektroskopii s Fourierovou transformací (vysoké rozlišení a citlivost i u molekul s velmi malou hodnotou dipólového momentu, u isotopických molekul v přirozeném složení).

A.Krupnov se spol. (Gorkij, SSSR) - novinky v submilimetrové spektroskopii (experimentální studie molekulových komplexů s vodíkovými vazbami, aparatura s Dopplerovským rozlišením, vysokou citlivostí a přesností frekvencí u molekul  $H_2O$ ,  $H_2O \cdot HF$ , (HF)<sub>2</sub> apod.).

E.Hirota (Ústav molekulárních věd, Okazaki, Japonsko) - IČ diodová laserová a mikrovlnná spektroskopie přechodných molekul (např. silyleny : SiXY, SiCl<sub>2</sub>, SiH<sub>2</sub>, HSiF, SiF<sub>2</sub>, SiFCl; radikály C<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>; alkalické monooxidy M<sub>0</sub>/M = Li, Na, K; např. pro <sup>7</sup>LiO 9 konstant,  $r_e = 1,688207(18)$  Å/.)

G.Dilonardo (Boloňa, Itálie) jednak připomnul slavné 900.výročí založení university, jednak pojednal o FTIR spektroskopii v oblasti kolem  $40\text{ cm}^{-1}$  jako vhodném oknu pro studium minoritních složek v atmosféře i stratosféře (např. ozon s isotopy, HF, HCl, oxidu dusíku, NOCl, ClNO<sub>3</sub>, HOCl apod. v koncentračních profilech do 26 km za dne, v noci, OH za noci, za dne a při západu slunce - souvislosti s fotochemickými reakcemi).

V teoretickém bloku byly např. presentovány pokroky v ab initio výpočtech molekulových potenciálů (W. P. Kramer, Garching, NSR), ve vibrační dynamice vodíkových vazeb HOH-H<sup>-</sup> (Špirko) a příspěvky z ústavu atmosférické optiky ze sibiřského Tomsku.

J.Vogt (Ulm, NSR) se zabýval databází a vyhledávacími programy v mikrovlnné a IČ spektroskopii vysokého rozlišení (MOGADOC - Molecular Gasphase Documentation přináší soubor spekter spolu s dalšími strukturními daty jako mezipjaderné vzdálenosti, vazebné úhly, atomové souřadnice na kompatibilních IBM PC. Viz též Bull.56/1988, str.28).

Aplikační význam pro ekologii, hvězdnou a atmosférickou fyziku má měření absolutních intenzit ve střední a vzdálené IČ oblasti (J.W.C.Johns, Herzbergův astrofyzikální ústav, NRC, Ottawa, Kanada); určení vibračních intenzit velmi reaktivních molekulových specií, např. NH (C.Chackerian a spol., NASA-Ames Res. Center, USA).

L.Rothman (USA) poskytl důkladné informace o databázi molekulové spektroskopie vysokého rozlišení (HITRAN) pro modelování atmosféry, uvedeno 28 specií, např. F<sub>11</sub>, F<sub>12</sub>, HNO<sub>3</sub>, ClONO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, zemská emise do 30 km, aplikace v souvislosti se skleníkovým efektem atd. až po SDI.

J.W.Tomm (Humboldtova universita, Berlin, NDR) demonstroval kontrolní systém čistoty ovzduší pomocí diodových laserů (sledovaný např. NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub>).

W.L.Meerts (Nijmegen, Holandsko) a spol. - vícefotonové přechody ve zkřížených molekulárních svazcích u molekul bez a s permanentním dipólovým momentem.

S.C.Ross (Fredericton, Kanada) - H<sub>2</sub> a stavy s dvojím minimem: vibronické hladiny z pohledu kolinské teorie.

H.Jones (Ulm, NSR) uvedl přehled o spektroskopii s diodovými lasery za vysokých teplot (z trysky se nadzvukovou rychlosí expandují v parádech do vakua mnohé anorganické soli, často jako dimery. IČ emise v těchto experimentech vedla k vývoji nového CW laseru par kovového sodíku (oblast  $1000\text{ cm}^{-1}$ ).

Z laboratoře M.Winnewissera (Giessen, NSR) referováno o kumulénových molekulách v mezihvězdné chemii, např. v molekulárním oblacu ve Střelci s útvary jako OC<sub>5</sub>O, SC<sub>3</sub>S, OC<sub>3</sub>S, C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, C<sub>4</sub>O apod.

K problematice struktury polyethylenu spektrální studie potenciálové bariéry trans-gauche isomerie v n-butanolu (W.Hüttner a spol., Ulm, NSR).

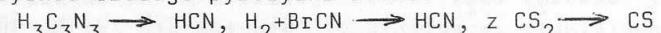
M.Takami a spol. (Japonsko) studovali diodovou laserovou spektroskopii metodou "free jet" ve střední IČ oblasti van der Waalsovy komplexy, např. (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>.Ar, (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>)<sub>2</sub> s T geometrií, (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, BF<sub>3</sub>.X (X=Ne, Ar, Kr), C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>.X (X=Ar, Kr) a (NO)<sub>2</sub>.

V.Langová, sličná mladá dáma (Caltech, Pasadena, USA) použila FTIR spektroskopii vysokého rozlišení k určování koncentrací radikálu ClO, hrajícího roli v katalytickém rozkladu ozonu v zemské stratosféře.

G.Guelachvili a spol. (Paříž, Francie) vyvinuli selektivní FTIR spektroskopii pro rozlišení nestálých radikálů mezi stálými molekulami pomocí konst. magnetického pole.

A.R.McKellar (Ottawa, Kanada) uváděl spektra van der Waalsových molekul, měřených FTIR spektrometrem BOMEM DA3.002 v dlouhých kyvetách při nízkých a velmi nízkých teplotách, např. (H<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, (D<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, (HD)<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>.Ar, H<sub>2</sub>.Ne, H<sub>2</sub>.Kr, D<sub>2</sub>.Ne.

Vývěsková sdělení byla převážně zaměřena na konkrétní molekuly resp. molekulární komplexy, např. mikrovlnná spektra tří konformací isobutanolu, cyklopropylgermanu, rotační vibrační pásy  $\text{HNO}_3$ , diodová laserová spektra  $\text{SnH}_4$ , povrchy potenciální energie a ab initio výpočty methanu, disiloxanu, GC-FTIR směsi aminů, spektra  $\text{D}_2\text{O}_2$ ,  $\text{F}_2\text{C} = \text{NH}$ ,  $\text{PH}_3$ , fluoroketanu  $\text{CHFCO}$ ,  $\text{H}_2\text{S}_2$ , kombinační pásy  $\text{NH}_3$  (Urban, Papoušek a další), rotační teploty acetylenu v nadzvukové trysce, spektra biatomických hydridů kovů ( $\text{NaH}$ ,  $\text{RbH}$ ,  $\text{BaH}$ ,  $\text{BeH}$ ); diodová laserová spektroskopie s pyrolyzní tryskou sleduje pyrolyzní reakce



rotační torsní projevy dimethylperoxidu, výpočty ab initio pro-pargylenu (Čársky, Špirko), FTIR deformačních modů  $\text{SO}_3$ , dále rotační vibrační pás  $\text{CH}_3\text{D}$  (FTIR BOMEM DA3.002, rozlišení  $0,006 \text{ cm}^{-1}$ , chlazený detektor InSb) a určení poměru D/H pro kosmologické teorie;  $\text{PH}_3$  a  $\text{CH}_3\text{D}$  v atmosféře Jupitera, spektrální studie ozonu pro určování koncentrace ozonu při různých teplotách, interpretační intenzity zakázaných rotačních vibračních přechodů ve spektrech  $\text{NH}_3$  (Urban, Pracna) a další. Paleta problémů pestrá a zájimavá z různého pohledu.

Některé postery byly formálně chudé (několik potištěných stránek formátu A4), jiné i formálně atraktivní, efektivní a názorné, s dokumentací, se snímky komplikovaných aparatur i tváří pracovníků (ty druhé byly vesměs ze zámoří).

Atmosféra konference byla jako vždy dělná, plná aktivity, neformálních diskusí až do pátečního poledne, kdy se účastníci, strávivší nepromarněný čas v příjemném prostředí liblického zámku, rozjízděli domů. Vedle odborné činnosti přispěl k tomu obvyklý úvodní koktejl, barbecue - liblická živářská v zámecké zahradě s pivem od čepu a produkce Talichova kvarteta v slavnostním sále.

Domnívám se, že z uvedeného výtahu konference vyplývá význam a závažnost presentované problematiky, týkající se dnes nejen úzce specializovaných spektroskopistů.

Dr. Bohuslav Strauch

#### OS vibrační spektroskopie

OS vibrační spektroskopie pořádala v lednu 1989 již tradiční kurs měření vibračních spekter, který se konal ve dvou týdenních turnusech v budově chemických kateder Přírodovědecké fakulty university Karlovy na Albertově, Praha 2.

První turnus byl věnován standardní problematice spektroskopie, druhý byl částečně upzpůsoben pro pracovníky z oblasti analýzy vod. Do programu tohoto turnusu byly proto zařazeny i přednášky z UV/VIS spektroskopie, spektrální analýzy vody a čs.ropných výrobků a praktika byla rozšířena o demonstrační cvičení na UV/VIS spektrometrech Specord M 40 a PU 8800.

Protože přednáška o čs.ropných výrobcích může zajímat širší obec čtenářů, je přiložen její podrobný výtah s tabulkou pří-sad, jejich spektrálních pásů a IČ spektra některých ropných výrobků. Spektra byla měřena na FTIR spektrofotometru PE 1760. V obou turnusech byla zařazena přednáška o automatické identifikaci IČ spekter pomocí knihoven spekter a bylo demonstrováno programové vybavení Philips Analytical SPECTRUM + PEAK SEARCH.

Výhody IČ spektrometrie s Fourierovou transformací byly demonstrovány na FTIR spektrometru PE 1760 s počítačem 7700. Zařízení laskavě zapůjčila firma Perkin Elmer GmbH, Wien ve spolupráci s pracovníky VÚPM k.p. Benzina.

O kurs pro vodaře se zasloužil Výzkumný ústav vodohospo-dářský zejména prostřednictvím jejich pracovníka Ing. Vavrou-cha.

Uskutečněná anketa potvrdila požadavek již předchozích kursů, uspořádat kurzy interpretací spekter. Na jejich koncep-ci a přípravě OS vibrační spektroskopie pracuje a předpoklá-dá jejich realizaci v r. 1990.

Za vedení kursu bych chtěl poděkovat účastníkům za do-brou disciplinu v průběhu obou turnusů a spolupracovníkům - lektorům za jejich úsilí, které pro zdar akce, jež byla klad-ně hodnocena, obětavě vynaložili. Naše Alma mater nám poskyt-la opět dobré pracovní prostředí a podmínky.

Dr. Bohuslav Strauch

Ing. J. Valdauf a Ing. T. Procházka, Chemopetrol, k.p. Benzina, VÚPM: Přehled kapalných produktů distri-buovaných k.p. Benzina a možnosti jejich stanovení IČ spektro-metrií

Chemopetrol, k.p. Benzina a n.p. Benzinol jsou monopol-ními distributory kapalných ropných výrobků. Destilací ropy a následnými rafinerskými procesy jsou získávány tyto hlavní produkty: automobilové a technické benzíny, petrolej, moto-rová nafta a topné oleje - lehký, střední a mazut. Vakuovou destilací mazutu se získávají mazací a speciální oleje.

Ropné produkty jsou zpravidla široké směsi uhlovodíků, zejména alkanů a cykloalkanů, které se v IČ spektru projevují charakteristickými absorpčními pásy. Nejvýraznější jsou ty, které přísluší valenčním vibracím vazby C-H (ze skupin  $-\text{CH}_3$ ,  $-\text{CH}_2-$ ,  $-\overset{\text{C}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-$ ) v oblasti vlnočtu kolem  $2900 \text{ cm}^{-1}$  a de-formačním vibracím vazby C-H v oblasti vlnočtu kolem  $1460 \text{ a } 1380 \text{ cm}^{-1}$ . Tyto pásy jsou přítomny ve všech kapalných produktech vyrobených destilací ropy. Jak vyplývá z obr. č. 1 až 4, jednotlivé produkty vykazují v IČ spektru další charakteristické pásy v závislosti na způsobu výroby, resp. na jejich chemickém složení.

Benzínová frakce z destilace ropy vře v rozmezí  $30-200^\circ\text{C}$ , obsahuje uhlovodíky  $\text{C}_4-\text{C}_{11}$  a připravují se z ní autobenziny a technické benzíny. IČ spektra benzínů se mezi sebou mohou značně lišit, zejména v oblastech vlnočtu  $3100 - 3000$ ,  $1900 - 1700$ ,  $1600 - 800$  a  $700 \text{ cm}^{-1}$ , které jsou charakteris-tické pro aromaticky vázaný uhlík ( $-\text{C}=\text{C}-$ , resp.  $\text{C}-\text{H}$  arom.). Jednotlivé druhy benzínů obsahují různé množství aromatic-

kých uhlovodíků - např. lékařský benzín, viz obr. č.1, vroucí v rozmezí  $35 - 100^{\circ}\text{C}$ , smí obsahovat max. 0,5 % hm. benzenu, lakový benzín, vroucí v rozmezí  $140 - 200^{\circ}\text{C}$ , obsahuje asi 10 - 15 % hm. aromatických uhlovodíků. Automobilové benzíny BA 90 - Speciál a BA 96 - Super obsahují max. 40 resp. 50 % hm. aromátů. IČ spektrum BA 96 C - Super je na obr. č.2 (písmeno C značí snížený obsah olova pod 0,15 g/l). Antidetonacní schopnosti autobenzinu BA 96 vyrobeného v Kralupské rafinérii a ve Slovnaftu bývají vylepšeny až 10 %-ním přídavkem methyl-terc. butyl-éteru, který má významný absorpční pás při  $1\ 202\ \text{cm}^{-1}$ .

Petrolejová frakce vře v rozmezí  $180 - 280^{\circ}\text{C}$ , obsahuje uhlovodíky  $\text{C}_{10} - \text{C}_{15}$  a slouží např. k přípravě paliv pro tryskové motory. Letecký petrolej PL - 6 je charakterizován velkým obsahem isoalkanů, obsah aromatických uhlovodíků nesmí překročit 20 %.

Motorová nafta se připravuje mísením plynového oleje, tj. ropné frakce vroucí v rozmezí  $250$  až  $360^{\circ}\text{C}$ , obsahující uhlovodíky  $\text{C}_{14} - \text{C}_{22}$ , s petrolejovou frakcí. Např. zimní nafta NM-22 obsahuje až 40 % petroleje, letní nafta NM - 4 nemusí obsahovat žádný. Uhlovodíkové složení nafty je odvísle zejména od druhu zpracovávané ropy. Podle hloubky rafinace a podílu petrolejové frakce nafta zpravidla obsahuje 25 - 45 % aromatických uhlovodíků (15 - 30 % aromatický vázaného uhlíku). IČ spektrum motorové nafty NM - 22B je na obr. č. 3 (písmeno B značí snížený obsah síry pod 0,15 % hm.).

Topné oleje L a S (lehký a střední) jsou převážně produkty primární destilace ropy, vroucí v širokém rozmezí teplot. Jsou to bohaté směsi uhlovodíků nažloutlé až tmavohnědé barvy.

Topný olej M (mazut) je destilační zbytek vroucí nad  $360^{\circ}\text{C}$ . Je tmavé až černé barvy a může obsahovat až 3 % hm. síry. Za normální teploty bývá tuhý - v závislosti na obsahu n - alkanů.

IČ spektra petroleje, nafty a topných olejů jsou velmi podobná. Určitým vodítkem při identifikaci může být, kromě rostoucí viskozity produktů též barva a stoupající obsah aromatických uhlovodíků. (Pro kvantitativní stanovení aromátů lze využít absorpční pás při  $1\ 607\ \text{cm}^{-1}$ ).

Mazací a speciální oleje jsou bohaté směsi vyšších uhlovodíků, jejich složení se liší podle druhu ropy, způsobu rafinace a podle zušlechťujících přísad (aditivů). Z celkové výroby mazacích olejů připadá asi 1/3 množství na motorové oleje. Široký čs. sortiment 22 druhů motorových olejů se vyrábí z vysoce rafinovaných základních olejů, které jsou zušlechťeny 2 až 10 druhů přísad v celkovém množství 2 - 20 % hm.

Typické složení základního oleje, který obsahuje 16 % aromátů a 70 % cykloalkanů, je na obr. č. 4 porovnáno s aditivovým olejem Super Mogul M 8 AD. Spektrum základního oleje je velmi blízké spektru nujolu absorpčními pásy při vlnočtu  $2\ 905$ ,

$1\ 455$ ,  $1\ 376\ \text{cm}^{-1}$ , včetně pásu při  $723\ \text{cm}^{-1}$ , který přísluší metylenové skupině  $(-\text{CH}_2-)_n$  pro  $n > 4$  z alkanických řetězců.

Absorpční pás při vlnočtu  $1\ 606\ \text{cm}^{-1}$  odpovídá valenčním vibracím - C = C - konjug. a je přímo úměrný obsahu aromatický vázaného uhlíku v oleji.

Identifikace motorových olejů pomocí IČ spekter není jednoduchá, neboť u olejů, které obsahují větší množství přísad, dochází k překryvu charakteristických pásku, event. načítáním pásku může docházet i k posunu maxim. Stejný výrobek může mít i odlišné složení přísad podle rafinérie, ve které byl vyroben.

Významná je i výroba převodových olejů, kterých je celkem 7 druhů; jejich zušlechťující přísady (souhrnné typické množství 3 %) vyzkoušejí charakteristické absorpční pásky zejména v oblasti vlnočtů  $1\ 200 - 1\ 000\ \text{cm}^{-1}$ .

Pro turbinové oleje je v IČ spektru charakteristický ostrý pás fenolické přísady při  $3\ 650\ \text{cm}^{-1}$ , stejně jako pro inhibovaný transformátorový olej.

Kvalitní hydraulické oleje je možné identifikovat podle malého množství dialkyldithiofosfátu zinečnatého a polymetakrylátové přísady.

Oleje ložiskové, nízkotuhoucí, kompresorové, válcové a tmavé neobsahují žádné přísady nebo jen velmi malé množství.

Řezné oleje obsahují větší množství zušlechťujících přísad, až 10 %. Podstatnou složkou jsou chlorparafiny.

Nejběžnější zušlechťující přísady používané v motorových olejích jsou uvedeny v tabulce č. 1.

Mazací a speciální oleje se připravují nejen na ropné bázi, nýbrž i syntetické. Nejrozšířenější skupinou jsou esterové oleje. Do této skupiny je možné zařadit i v minulosti velmi používané rostlinné oleje, což jsou estery vyšších mastných kyselek a glycerolu. V současné době se začínají používat, zejména pro některé motorové a hydraulické oleje, syntetické estery monokarboxylových kyselin a primárních alkoholů. IČ spektra esterů si jsou podobná, obsahují charakteristické absorpční pásky

v oblasti vlnočtu při  $1\ 730$  a  $1\ 150\ \text{cm}^{-1}$ .

V r. 1983 skončila v ČSSR výroba hydraulického oleje Hydrolor, transformátorového a kondenzátorového oleje Delor a teplonosného média Deloterm. Všechny tři oleje jsou vyrobeny na bázi polychlorovaných bifenylů (PCB). Jejich stanovení IČ spektrometrií je popsáno v literatuře [1].

Obdobně omezenou hořlavostí jako PCB se vyznačovaly i dříve vyráběné estery kyseliny fosforečné, které byly používány zejména jako nehořlavé hydraulické kapaliny. Typické složení je  $(\text{RO})_3\text{P}=0$ , kde R značí různé alkyly, resp. aryl. Estery vyzkouší v IČ spektru charakteristické absorpční pásky v oblasti  $1\ 200$  a  $1\ 000\ \text{cm}^{-1}$ .

Polysiloxany, nejčastěji polymethylsiloxany

$[-\text{Si}(\text{CH}_3)_2-\text{O}-]_n$ , běžně nazývané silikonové oleje, se používají převážně pro speciální účely. V IČ spektru vyzkouší charakteristické absorpční pásky v oblasti kolem  $1\ 080$  a  $900\ \text{cm}^{-1}$ .

Stále významnější místo zaujímají polyolefinové oleje. Kromě již vyráběného polypropylénového oleje se připravuje výroba významného množství syntetických olejů (např. motorových) na bázi polyalfaolefinů. IČ spektra základních polypropylénových a

polyalfaolefinových olejů jsou velmi podobná spektrum ropných olejů, neobsahují však charakteristický pás aromátů při  $1\ 600\text{ cm}^{-1}$ .

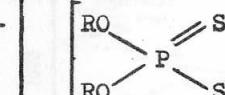
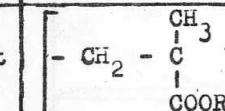
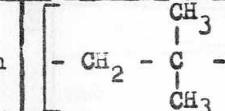
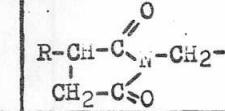
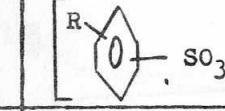
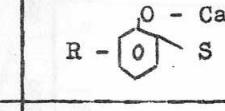
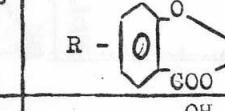
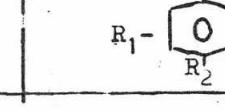
Tento pás je naopak charakteristický pro alkylbenzénové oleje, jejichž výroba započne v nejbližší době na Slovensku.

Katalog výrobků distribuovaných k.p. Benzina obsahuje i speciální přípravky, jako brzdovou kapalinu, což je směs esterů glykolů s polyglykoly, které v IČ spektru vykazují charakteristické pásy při  $3\ 400$  a  $1\ 100\text{ cm}^{-1}$ . Fridex Spolana a Fridex stabil jsou nemrznoucí kapaliny na bázi etylenglykolu. V IČ spektru vykazují charakteristické pásy při  $3\ 400$ ,  $1\ 080$  a  $1\ 040\text{ cm}^{-1}$ .

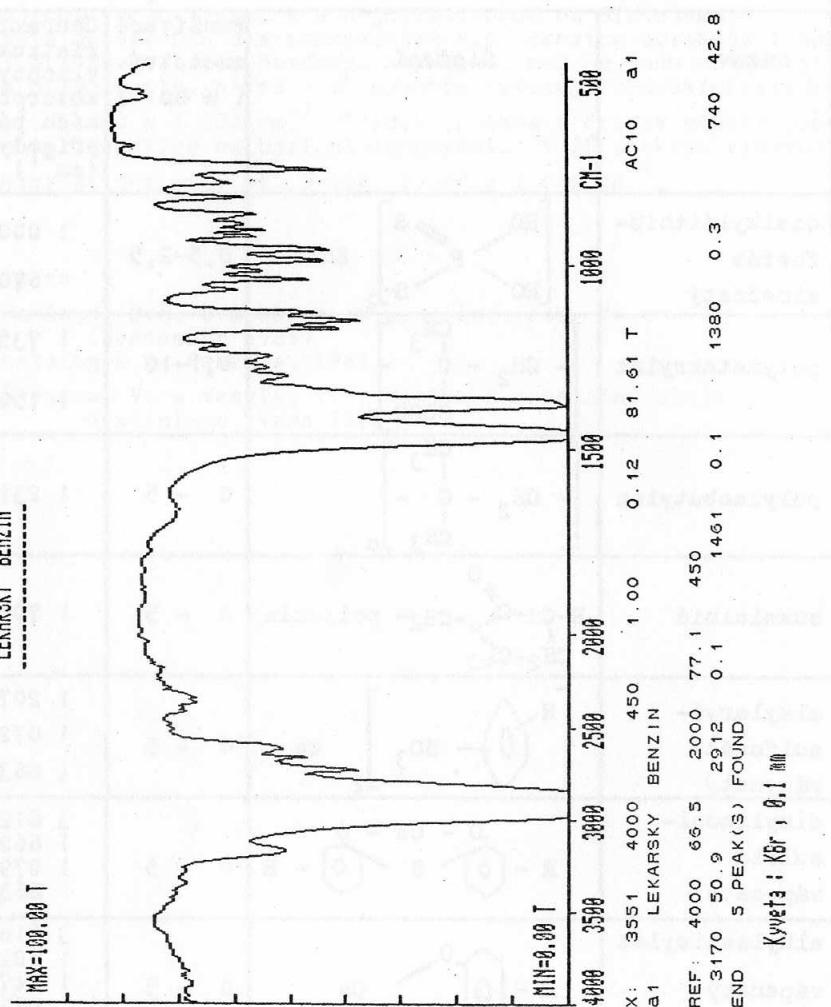
#### Literatura

- [1] Haaland, D.M. a Barbour, R.L. : Inf. Lab. 26 (September 1985)
- [2] Katalog k.p. Benzina, 1987
- [3] Štěpina, V. a Veselý, V. : Maziva a speciální oleje Bratislava, Veda 1980

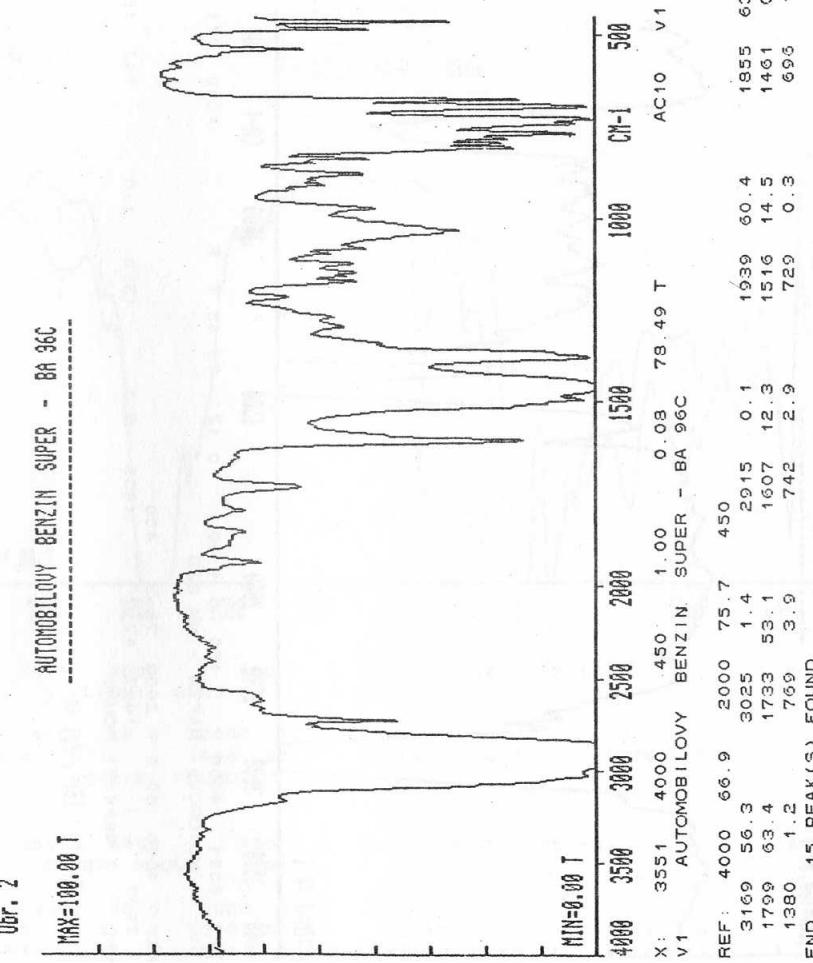
Tabulka č. 1

Název	Složení	Používané množství (% hm.)	Charakteristické vlnočty absorpcních pásů příslušady (cm $^{-1}$ )
dialkyldithiofosfát zinečnatý		0,5-2,5	1 000 670
polymetakrylát		0,1-10	1 735 1 150
polyizobutylén		0 - 5	1 231
sukcinimid		0 - 5	1 705
alkylaryl-sulfonát vápenatý		0 - 5	1 207 1 072 ( 863 )
alkylfenol-sulfid vápenatý		0 - 5	3 612 1 662 1 079 863
alkylsalicylát vápenatý		0 - 5	3 616 1 602 1 247 863
2,6-di-terc-butyl-4-metylfenol		0 - 1	3 650

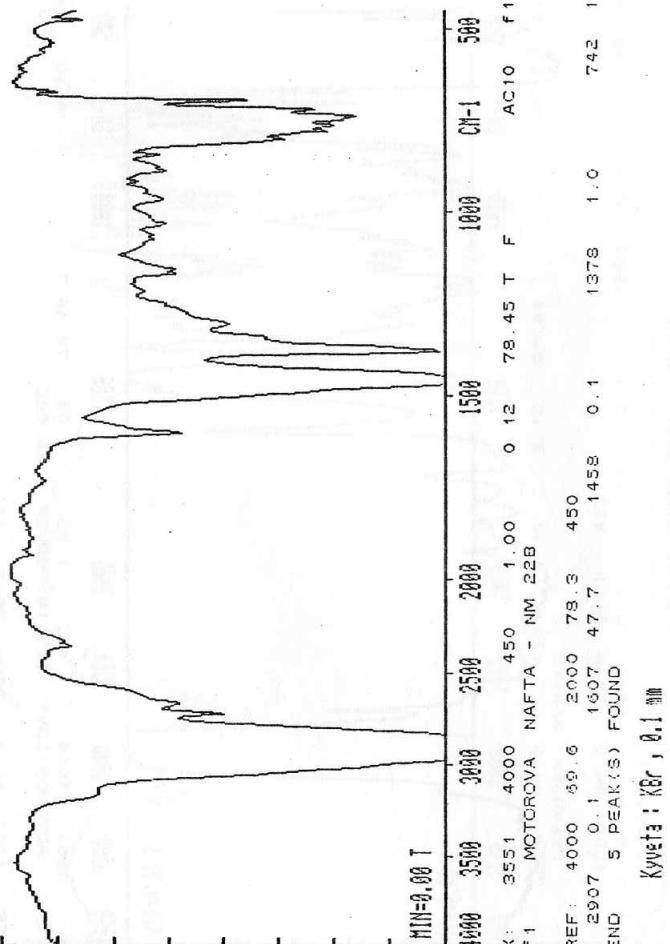
LEKÁRSKY BENZIN



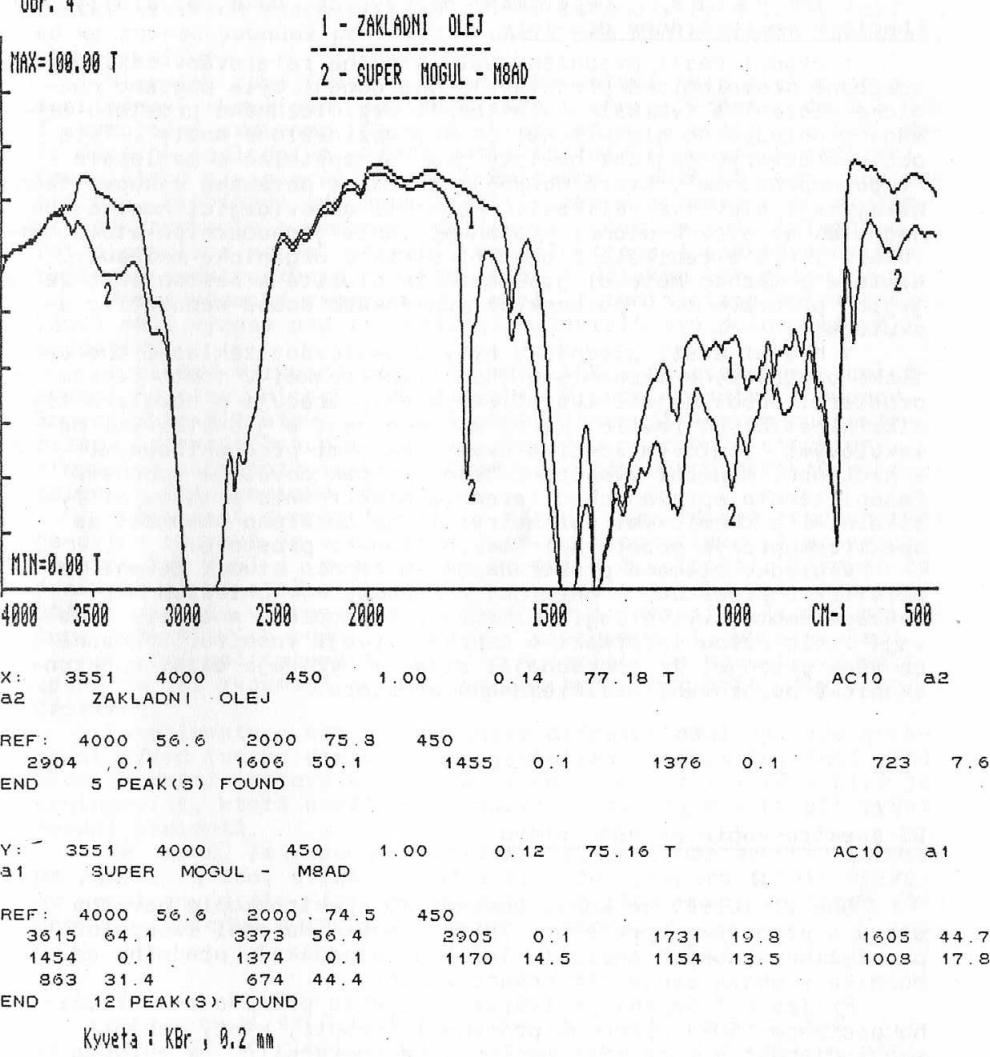
AUTOMOBILOVÝ BENZIN SUPER - BA 96C



Obr. 3  
MOTOROVÁ NAFTA - NM 22B



Obr. 4



OS vibrační spektroskopie uspořádala 25.7.1989 v Praze pod vedením Dr. Štěpána Urbana, CSc schůzi na téma "Spektroskopie mezihvězdných molekul", jíž se zúčastnilo 29 členů. Dále přinášíme resumé přednášky zahraničního hosta.

Eric Herbst, Department of Physics, Duke University, USA:  
Chemie v mezihvězdném prostoru

V úvodní části přednášky byly stručně referovány základní současné kosmologické představy a podrobněji bylo popsáno chemické složení a fyzikální vlastnosti mezihvězdného prostoru zejména s ohledem na gigantické "oblaky mezihvězdné hmoty". Tyto podivné útvary, jejichž hustota jsou srovnatelné s nejlepším "vzduchoprázdnem", které dosahuje současná pozemská vakuová technika, mají díky své velikosti hmotnosti odpovídající hmotnostem jednotek až stovek sluncí. Obsahují vedle jednoduchých atomů, molekul, iontů a radikálů i poměrně složité organické molekuly. Některé z těchto molekul jsou natolik složité a nestabilní, že jejich přípravu se v pozemských podmínkách dosud nepodařilo uskutečnit.

V hlavní části přednášky byly diskutovány základní teoretické představy o mechanismu chemických reakcí v tomto řídkém prostoru. Odpovídající teoretické modely pracují s několika tisíci kinetických rovnic, které korespondují s jednotlivými molekulovými, iontovými radikálovými reakcemi předpokládanými v prostoru. Moderní výpočetní technika pak dovoluje současné řešení těchto spřažených diferenciálních rovnic s takovými fyzikálními a chemickými parametry, že je dosaženo souhlasu se spektroskopickým pozorováním mezihvězdného prostoru.

Výsledky získané prostřednictvím těchto studií dávají realistickou představu o chemických procesech v oblacích mezihvězdné hmoty, vysvětlují pozorované isotopické anomálie a dávají zcela novou informaci o časovém vývoji vesmíru. Současně se však ukazuje, že podrobnější studium vyžaduje další spektroskopické pozorování mezihvězdného prostoru.

#### OS spektroskopie pevného stavu

Dne 21.1.1989 se konal seminář OS spektroskopie pevného stavu s přednáškou profesora Taizo Sasaki (Národní laboratoř pro fyziku vysokých energií, Tsukuba, Japonsko), předního odborníka v oboru synchrotronového záření.

Profesor T. Sasaki je tvůrcem projektu prvního akumulačního prstence (SOR) určeného pro spektroskopii, který zahájil svoji činnost v roce 1965 na Tokijské universitě. Je autorem řady spektroskopických prací v oboru atomové a molekulární fyziky, fyziky pevných látek a techniky synchrotronového záření. Je presidentem Japonské společnosti pro synchrotronové záření a podílí se na budování zdrojů nové generace v Japonsku i v rámci evropsko-japonské spolupráce.

Semináře se zúčastnilo 18 členů odborné skupiny. Seminář řídila Dr. M. Závětová, CSc, která také připravila následující výtah z přednášky.

Taizo Sasaki, National Laboratory for High Energy Physics, Tsukuba, Japan : On state - of the art synchrotron radiation research in Japan

Výzkumné centrum synchrotronového záření v Japonsku zvané Továrna na fotony (Photon Factory) při Národní laboratoři pro fyziku vysokých energií (KEK) bylo založeno v roce 1978, leží 60 km severovýchodně od Tokya a patří pod Ministerstvo školství, vědy a kultury.

Hlavními zdroji synchrotronového záření jsou elektronově-positronový akumulační prstenec (AR) s energií častic' do 2,5 GeV a akumulační prstenec (Tristan) s maximální energií 6,5 GeV. Mezi úspěchy posledního období patří instalace vsuvných zařízení (nudulátorů a viglerů), snížení emitance a možnost akumulace pozitronů. Probíhají zde experimenty v oboru atomové a molekulární spektroskopie s vysokým rozlišením, studium fotoionizace a fotodisociace malých molekul, fotoelektronová spektroskopie a reflexní spektroskopie pevných látek v dalekém VUV oboru.

Mnohé vědecké experimenty (např. fotodisociace molekul silánu) mají význam pro technologii materiálů pro polovodičové součástky.

Společné výzkumné programy mezi KEK a průmyslovými společnostmi Fujitsu, Hitachi, Mitsubishi, Nippon Electric Company, Sony, Shiu-Nittetsu, Sony a Toshiba zahrnují výzkum charakterizace polovodičových materiálů, analýzu povrchové struktury, stopových nečistot, in-situ pozorování růstových defektů v krysatelech a fotochemické reakce.

Budoucnost synchrotronového záření jako zdroje tvrdých rentgenových paprsků je v možnosti rychlé litografické přípravy prvků struktur VLSI s vysokou dokonalostí a životností. Zároveň záření slouží ke studiu topografie povrchu a jejího vlivu na rozdělení defektů v krystalech a umožňuje pozorovat i jemnou strukturu jednotlivých bodů lanogramů, způsobenou vlivem dislokací.

Pomocí počítacové tomografie materiálů se nedestruktivním způsobem též zkoumají jednotlivé přechody mezi materiály v součástkách.

Experimenty v oboru rentgenové difracce umožňují zde pozorovat přímo tvorbu diamantů na vysokotlaké aparatuře, růst virů nebo zkoumání svalové kontrakce. Známou aplikací v lékařství je angiografie, která umožňuje vyloučit zdravotní rizika při vyšetřování pacientů.

Je jasné, že Japonsko přikládá velký význam synchrotronovému záření, o čemž svědčí zejména finanční podpora tohoto výzkumu se strany státu. Tato podpora se zřetelně vrací ve formě vědeckých výsledků a technologického pokroku.

Na pracovní schůzi skupiny dne 26.4.1989 ve FzÚ ČSAV, jíž se zúčastnilo 15 členů, přednesl přednášku "Fototermoionizační spektroskopie polovodičů". Nový typ příměsi v polovodičích" prof. V.I. Ivanov-Omský z Fyzikálně technického ústavu AN SSSR v Leningradě. Navázal na přednášku prof. Gelmonta z téhož pracoviště (viz Bulletin 56/1988).

Na příkladu superčistého Ge ( $n \sim 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ) byl vysvětlen princip metody fototermoionizační laserové magnetospektr-

skopie vysokého rozlišení ( $\sim 0.01 \text{ cm}^{-1}$ ). Byla studována spektra donorových komplexů (tvořených O a H nebo Li), nalezena multipletová struktura odpovídající těmto komplexům a diamagnetický posuv termů multipletů.

#### OS elektronové spektroskopie a fotochemie

uspořádala ve dnech 4. - 6.4.1989 v Pardubicích seminář na téma "Nová organická barviva s hlubokými odstíny. Elektronová spektra azobarviv", jehož se zúčastnilo 35 členů. Program semináře byl obohacen přednáškami Dr.J.Fabiana z TU Drážďany "Barviva s absorpcí v blízké IČ oblasti" a "Struktura a vlastnosti síných sloučenin". V prvé přednášce byl podán stručný výklad o dosavadních poznatcích o barvivech, absorbuječích v blízké IČ oblasti, byly diskutovány vztahy mezi strukturou a vlastnostmi diskutované třídy sloučenin a charakterisovány oblasti praktické aplikace těchto barviv.

V druhé přednášce byly z teoretického hlediska diskutovány struktura a vlastnosti síných heterocyklů, výhody a nevýhody teoretických modelů a uvedené výsledky byly porovnávány s analogickými sloučeninami s jinými heteroatomy. Na základě teoretických výsledků je možno předpovídat strukturu síných heterocyklů s požadovanými vlastnostmi.

Na závěr semináře byla zevrubně diskutována problematika elektronových spekter azobarviv při hlubokých teplotách a jejich interpretace. Diskuse se aktivně zúčastnil Dr.Fabian a z našich členů pak zejména pracovníci VÚOS Pardubice-Rybitví (Nepraš, Luňák, Titz, Hrdina, Novák).

Ing.M.Nepraš, DrSc

## SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

#### OS instrumentálních radioanalytických metod

Konference IAA 89 byla první akcí OS instrumentálních radioanalytických metod s mezinárodní účastí. Celkem se jí zúčastnilo 52 odborníků a bylo předneseno 43 příspěvků. Účast jugoslávských kolegů přinesla zpestření programu o téma, která zatím u nás nejsou v širší míře aplikována - jedná se zejména o využití standardizace metody NAA pomocí faktorů.

Odborný program byl již tradičně zaměřen na tyto tématické okruhy: neutronovou aktivaci analýzu (metodika, aplikace) včetně varianty s využitím promptního záření (celkem 15 příspěvků), metodu rentgenfluorescenční analýzy včetně metody PIXE (5 referátů), aplikace radioaktivních indikátorů v průmyslu (2 příspěvky), měření pirozené radioaktivity v různých typech vzorků (4 referáty), obecné problémy gamaspekrometrie a využití výpočetní techniky (10 příspěvků), využití pružného rozptylu neutronů v průmyslové praxi (2 příspěvky). Mimo uvedené okruhy bylo zaměřeno 5 příspěvků.

Časový rozvrh konference ponechával dost času na diskuze, které byly neformální a pro všechny účastníky velmi užitečné. Odborný program IAA 89 zahrnul celou šíři problematiky radioanalytických metod u nás. Ukazuje se, že jsou řešeny jak obecné problémy, zejména metodické, tak se nezapomíná ani na aplikace nejen v průmyslu, ale i v životním prostředí, lékařství nebo zemědělství. Příští konference IAA 90 se bude konat začátkem června 1990 opět ve Školícím středisku ZRUP v Klučenicích. Toto středisko vytváří pro odborná setkání IAA tradičně příznivou atmosféru.

Ing.Ivan Obrusník, CSc

## OS rentgenové spektrometrie

Kurs rentgenové spektrometrie se uskutečnil ve dnech 22. - 26.5.1989 v Karlově Studánce. Kurs navázal na tradici již dříve pořádaných kursů pro pokročilé v oboru rtg spektrální analýzy. Nově byly do kurzu zařazeny i přednášky o možnostech využití RFA při kontrole znečištění životního prostředí. Kursu se zúčastnilo celkem 48 pracovníků, kteří mají většinou značné zkušenosti v oboru RFA a tomu odpovídalo i tématické zaměření a náročnost jednotlivých přednášek.

Přednášky pro kurs připravili Dr. Drahokoupil, Ing. Čechák, Dr. Pelikánová, Ing. Kolečkář, Ing. Walder, Dr. Láznička, Ing. Damašková, Ing. Merta, Ing. Helan, Ing. Žilka, Ing. Ersepke, Dr. Macháček a Dr. Kern.

Účastníci kurzu obdrželi kopie skript vydaných pro potřebu minulého kurzu v Čeladné. Program a průběh kurzu byl jeho účastníky hodnocen velmi dobře a bylo dohodnuto, že by se obdobný kurz měl pořádat i v budoucnu. Bude ale nutné kurz nově koncipovat. Některé přednášky by mohly být presentovány ve formě posteru.

## OS Mössbauerovy spektroskopie

OS Mössbauerovy spektroskopie uspořádala ve dnech 14.-15.6. 1989 ve Stupavě pracovní setkání svých členů a také seminář na téma "Aplikace Mössbauerovy spektroskopie při sledování vlastností materiálů perspektivních pro praxi". V organizační části zasedání oznamil vedoucí OS Doc.Ing.J.Sitek,CSc, že se po šestnáctiletém působení v čele skupiny své funkce vzdává a poděkoval členům za důvěru i podporu, jež mu prokazovali.

Vedoucím OS byl pak zvolen Ing. Oldřich Schneeweiss, CSc z ÚFM Brno.

Odborný program semináře připravil Doc.Sitek. Přinášíme resumé přednesených příspěvků.

### T. Zemčík, ÚFM ČSAV Brno : Relaxace hyperjemných polí v amorfních slitinách

Mössbauerova spektroskopie, která citlivě reaguje na strukturní i magnetické změny v materiálu, je výhodná pro sledování nevratných relaxačních změn amorfních slitin v důsledku dlouhodobé teplotní expozice. Klíčovou metodickou roli zde hraje stanovení hyperjemných polí z experimentu. Přístup předpokládající dvourozměrnou distribuci hyperjemných parametrů (efektivní magnetická indukce a společný vliv isomerního posuvu a kvadrupolového štěpení 1.řádu) a fitující polohy čar zahrnutím kvadrupolových efektů 2.řádu, vede k podstatnému zpřesnění approximace tvaru spekter a zkvalitnění získaných informací. Aplikace na sérii spekter amorfní slitiny  $Fe_{70}Co_{10}B_{20}$  v různých stádiích isotermního ohřevu při  $125^{\circ}C$ , tj. při teplotě blízké exploatačním podmínkám, umožnila rozlišení dvou různých relaxačních procesů. Systematické mössbauerovské studium isotermních relaxací série

amorfních slitin  $Fe_{85-x}Co_xB_{15}$  ( $x = 17, 19, 21$  at. % Co) při  $100 - 200^{\circ}C$  dalo výsledky srovnatelné s měřením změn koercitivní síly svědčící rovněž o dvou stádiích relaxací, pravděpodobně odstranění zakalených pnutí a volného objemu.

### S.Havlíček, T. Zemčík, ÚFM ČSAV Brno : Kinetika krystallizace v amorfních slitinách Fe-Co-B

Byly diskutovány výsledky mössbauerovských měření v průběhu izotermního krystallizačního procesu amorfních slitin  $Fe_{85-x}Co_xB_{15}$  ( $x = 12, 21$ ). Měření bylo prováděno jednak metodou přerušovaného postupného žihání vzorků na teplotě mezi  $320-345^{\circ}C$  a celkové době žihání 336 hod, jednak přímo metodou vysokoteplotního scanningu za konstantní rychlosti.

V prvním případě se krystallizační proces stanovil analyzou ploch jednotlivých transmisiích mössbauerovských spekter naměřených pro příslušnou koncentraci Co po každém žihání vzorku. Ve druhém případě se kinetika krystallizace sledovala přímým měřením časové závislosti intenzity absorpcie vnější čáry kovové fáze vysokoteplotního spektra vzorku při konstantní rychlosti. V obou případech byly pomocí Johnson-Mehl-Avramiho kinetické rovnice získány charakteristické časy  $\tau$  a pomocí Arrheniova vztahu byly spočteny aktivační entalpie procesů  $\Delta H$ . Bylo prokázáno, že amorfní slitiny Fe-Co-B krystalizují nejméně dvoustupňově, nejprve poměrně rychle  $\alpha$ -Fe a potom postupně směsné boridy.

### I. Škorvánek, Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice : Vplyv dlhodobého žihania na magnetické vlastnosti kovových skiel typu FeNiCrMoSiB

Bol študovaný vplyv dlhodobého žihania na parametre Mössbauerových spektier, Curieho teplotu a teplotnú závislosť spontánnej magnetizácie kovových skiel zloženia

$Fe_{30}Ni_{44}Cr_4Mo_2Si_5B_{15}$  a  $Fe_{30}Ni_{48}Mo_2Si_5B_{15}$ . Bolo zistené, že dlhodobé žihanie vedie k výraznému posuvu distribúcie hyperjemného magnetického poia smerom k vyšším poliam a k rotácii vektora magnetickej polarizácie smerom von z roviny pásičovej vzorky.

Z teplotných závislostí spontánnej magnetizácie bolo zistené, že žihanie vedie k rastu výmennej konštanty a Curieho teploty.

Pozorované zmeny boli diskutované z hľadiska možných zmien indukovaných žiháním v najbližšom okolí magnetických atómov v skúmaných vzorkach.

### T.Zemčík, ÚFM ČSAV Brno : Univerzální FFT maticová metoda pro zpracování Mössbauerových spekter a příklady jejího použití

Na pracovišti byla vyvinuta nová metoda fitování Mössbauerových spekter, spočívající v modelování konvoluce distribuce hyperjemných polí (diracovské, gaussovské, popř. jiné a jejich superpozicemi) užitím FFT algoritmu Fourierovy transformace. Spolu s maticovou reprezentací transformací a vazeb fyzikálních parametrů spekter byla metoda s využitím optimální

lizačního systému OPTIPACK implementována na počítači ICL 290/10 pod názvem CONFIT. Spolu s řadou obslužných programů umožnuje tento systém operativní zpracování široké třídy spekter v interaktivním i v dávkovém režimu. Příklady využití této metody je zpracování spekter tuhých roztoků na bázi železa (superpozice vázaných lorentzovských sextetů), fázová analýza ocelí (přítomnost singletů a dubletů nemagnetických fází - austenitů a karbidů - ve složité superpozici sextetů fází magnetických - martenzitu a austenitu), stanovení magnetické textury amorfních slitin (úhlová závislost poměru ploch složek širokých, gaussovských distribuovaných sextetů) a konečně analýza spekter krystalizujících amorfních slitin (superpozici násobných diracovských a gaussovských distribucí).

M. Seberíni, Katedra jadrovej fyziky a techniky EF SVŠT, Bratislava : Mössbauerova spektroskopia konverzných elektrónov na KJFT EF SVŠT

Mössbauerova spektroskopia konverzných elektrónov je účinným nástrojom k meraniu tenkých (rádovo desiatky až stovky nm) povrchových vrstvičiek s obsahom železa.

Doteraz vykonané experimenty mali úvodný a orientačný charakter s cieľom rozpracovať metodiku merania. S plynovým prietokovým detektorom sa určila približná závislosť účinnosti detektora od tlaku plynu a napäťia, používala sa zmes hélium - metan.

Na zistenie rýchlosťi oxidácie a zloženia oxidov v povrchovej vrstve sme pripravili vzorky Fe fólií oxidovaných vo vzduchovej atmosfére pri teplotách od 250 °C do 650 °C. Získanú sériu vzoriek sme premerali transmisiou Mössbauerovou spektroskopiou. Z výsledku sme ako vhodnú teplotu pri ktorej oxidácia prebieha dostatočne pomaly zvolili 400 °C. Pri tejto teplote sme vo vzduchovej atmosfére oxidovali vzorky Fe fólie 0,009 mm po dobu 0,5 k až 3 h. Takto oxidované vzorky sme zmerali jednak transmisiou Mössbauerovou spektroskopiou, ako aj pomocou detektie konverzných elektrónov. Takto sa podarilo určiť približné fázové zloženie povrchovej vrstvičky do hrúbky cca 400 nm.

V.V. Nemoshkalenko, N.A. Tomashevskij, O.N. Rasumov, Institut of Metall. Phys., Ukr. Akad. Sci., Kiev, USSR : CEMS - GAS FLOW COUNTERS AND INVESTIGATIONS OF SURFACE LAYERS AFTER LASER IRRADIATION

Gas - flow counters are widely used in nuclear gamma-resonance spectroscopy. They are very efficient for registration of electrons ejected from a sample but are almost insensitive to X-ray and gamma radiation passing through a working volume of the counter. Let us consider possible ways of increasing the efficiency of such counters in Mössbauer spectroscopy. First, it is used as a filter for suppressing X-ray radiation from a source of resonance  $\gamma$ -quanta.

Second, it is important to choose a material for the counter window. Third, the counter body itself should be made from a conductive material to prevent the accumulation of

electrostatic charge. The counter corresponding to these conditions was exploited for studying the laser treatment of the binary systems: Fe-Nb, Fe-Zr and Fe-Ta. The laser treatment of the surface was performed in a shielding medium by 1.5  $\mu$ s light pulses ( $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$ ) with an energy density ensuring the melting of a thin surface layer. The quantitative relationship of formed phases on the surface layer depends on many factors but the general thing for all systems is the formation of a phase with minimum fusion temperature in the layer nearest to the specimen surface.

P. Valko, Katedra jadrovej fyziky a techniky, EF SVŠT, Bratislava : Mössbauerová spektroskopia a vysokoteplotná supravodivosť

Mössbauerova spektroskopia, ktorá je veľmi citlivá na štruktúrne zmeny materiálov, ako aj na možné fázové prechody v týchto materiáloch, je mimoriadne vhodná pre sledovanie vlastností vysokoteplotných supravodičov. Pre použitie supravodičov v experimentálnej praxi je nutné poznat ich kvalitu. Táto je tiež metodami Mössbauerovej spektroskopie určitejná.

Pre účely Mössbauerovej spektroskopie boli vzorky systému Y-Ba-Cu-O dopované 5% at. prirodzeného železa. Iné vzorky obsahujúce európium boli analyzované pomocou Mössbauerových prechodov izotopu  $^{151}\text{Eu}$ .

Dosiahnuté výsledky sú porovnateíne s výsledkami získanými inými skupinami a potvrdzujú existenciu tzv. 1-2-3 štruktúry vo vzorkach vysokoteplotných supravodičov.

Ďalšie dôležité výsledky boli dosiahnuté pri sledovaní prípravy vysokoteplotných supravodičov, ktoré potvrdili, že pre vznik fáz spojených so supravodivosťou v systéme Y-Ba-Cu-O je potrebná teplota aspoň 800°C.

M. Miglierini, J. Sitek, Katedra jadrovej fyziky a techniky EF SVŠT, Bratislava : Vplyv ožiarenia neutronmi na lokálne usporiadanie amorfnych kovových zliatin

Sledovali sme vlastnosti amorfnych kovových zliatin  $\text{Fe}_{80-x}\text{Ni}_x\text{B}_{20}$  pre  $x = 10, 20, 30, 40$  po ožiareniu neutrónmi. Ich fluencie sa pohybovali od  $10^{14}$  po  $10^{19} \text{n cm}^{-2}$ . Výsledky dosiahnuté meraním metódou Mössbauerovej spektroskopie ukázali, že uvedená amorfna kovová zliatina je rôzne citlivá na ožiarenie neutrónmi a závisí od koncentrácie niklu.

Zliatina pre  $x = 40$  je radiačne najodolnejšia. Merania pomocou elektron-pozitrólovej anihilácie ukázali, že ožiareniom neutrónmi dochádza k zmene voľného objemu. Merania zbytkovej aktivity vzoriek ukázali, že merná aktivita je najnižšia pre vzorku s najvyšším obsahom niklu.

Výsledky dosiahnuté spomenutými metódami korelujú i s klasickými magnetickými meraniami. Merania tak tiež ukázali, že je možné rôznymi metódami sledovať zmeny v usporiadani na krátku vzdialenosť vyvolané ožiareniom a priradiť ich čiastočne k chemickým a čiastočne k topologickým zmenám.

J. Lipka, Katedra jadrovej fyziky a techniky EF SVŠT  
Bratislava : Štúdium hexagonálnych Ba-feritov

Hexagonálne bárnate ferity sú v súčasnej dobe zaujímané z hľadiska ich využitia pre magnetický záznam. V príspovedi boli uvedené výsledky aplikácie Mössbauerovej spektroskopie pri optimalizácii technologického postupu prípravy uvedených feritov mokrou cestou. Vzorky boli pripravované na Katedre teoretickej a experimentálnej elektrotechniky EF SVŠT. Zistili sme, že počiatok tvorby hexagonálnej štruktúry je pri  $600^{\circ}\text{C}$ .

Po vyhriati na  $950^{\circ}\text{C}$  dochádza k dokonalému usporiadaniu štruktúry. K odstráneniu nežiaduceho monoferitu  $\text{BaFe}_2\text{O}_4$  sme dosiahli luhovaním v 50% HCl počas 15 minút.

Celý proces prípravy sme sledovali tiež pomocou röntgenovej difrakcie, DTA, infračervenej spektroskopie a meraním teplostnej závislosti susceptibility.

O. Schneeweiss, T. Žák, ÚFM ČSAV Brno : Struktura a magnetické vlastnosti pásku  $\text{Fe}_{87}\text{Mn}_x\text{Si}_{13-x}$

Slitina  $\text{Fe}_{87}\text{Si}_{13}$  má dobré vlastnosti ako magneticky měkký materiál, avšak jejímu širšímu praktickému využití brání její nevhodné mechanické vlastnosti. Proto se hledá legující prvek, který by je zlepšil a přitom zachoval dobré magnetické vlastnosti. Příkladem je legování manganim, jehož vliv na strukturu a magnetické vlastnosti jsme studovali.

Pásy slitin  $\text{Fe}_{87}\text{Mn}_x\text{Si}_{13-x}$ ,  $x = 0; 0,5; 0,9$  byly připraveny metodou ochlazení taveniny mezi dvojicí rotujících ocelových válčů. Jejich struktura byla vyšetřována Mössbauerovou spektroskopíí, z magnetických vlastností byly měřeny koercitivní síla a nasycená magnetická polarizace. Vzorky byly zkoumány v základním (tj. kaleném) stavu a po žíhání  $1\ 000^{\circ}\text{C}/\text{hod}$  ve vodíku.

V základním stavu bylo zjištěno, že atomy Mn obsazují v matrici FeSi pozice atomů Fe. Po žíhání nebylo možno přítomnost Mn ve spektrech zjistit. Předpokládáme, že se difúzí přemístily ze základní matrice na hranice zrn nebo volný povrch, popřípadě vytvořily novou fázi, kterou nelze ve spektru identifikovat. Legování manganim rovněž ovlivňuje magnetickou strukturu. Zatímco ve vzorku  $\text{Fe}_{87}\text{Si}_{13}$  se po žíhání vyvinulo izotropní rozložení spinů, ve vzorcích s Mn spiny preferují orientaci v podélném směru pásku. Legování manganim zlepšuje mechanické vlastnosti, zvyšuje hodnotu nasycené magnetické polarizace, zároveň však i koercitivní sílu.

O. Schneeweiss, ÚFM ČSAV Brno, K. Voleník, SVÚOM Praha : Studium kovových povrchů legovaných pomocí laseru metodou Mössbauerovy spektroskopie

Legování povrchů pomocí laseru je významnou technologií zvyšující užitné vlastnosti součástí vyrobených z nelegovaných ocelí. Pomocí Mössbauerovy spektroskopie je možné získat důležité informace o fázovém složení a procesu vzniku povrchové vrstvy. Specifickost fázové analýzy spočívá v tom, že povrho-

vá vrstva se vytváří rychlým ochlazením taveniny a vzniklé fáze jsou často metastabilní s malým rozměrem koherentních oblastí. Závažnosť výsledků získaných z mössbauerovských spekter na  $^{57}\text{Fe}$  v geometrii na odraz je dokumentována na příkladech dvou typů vrstev nanesených na substrát z oceli ČSN 41 1321 a to na bázi slitin CoCr a NiCr.

Ve vrstvě CoCr byla identifikována vysokoteplotní fcc CoCrFe fáze, která v rovnovážném diagramu existuje mezi teplotou tání a  $600^{\circ}\text{C}$ . V závislosti na hmotnosti přidávaného legovacího prášku byla pozorována změna efektivní emise. Rozborem možných příčin byl vyloučen efekt saturace vlivem změn efektivní tloušťky jako důsledek různého obsahu železa. Rozdíl v hodnotách Lamb-Mössbauerova faktoru pravděpodobně vyplývá z různých rychlostí ochlazení povrchové vrstvy v závislosti na množství legujícího prášku.

Ve vrstvě NiCr byly ve spektrech určeny dvě fáze - feromagnetická  $\text{Ni}_3\text{Fe}(\text{Cr})$  a paramagnetická  $\text{Ni}_2\text{Cr}(\text{Fe})$ . Na rozdíl od publikovaných dat z neutronové difrakce o systému  $\text{Ni}_3\text{Fe} - \text{Ni}_2\text{Cr}$  je existence okolí typu  $\text{Ni}_3\text{Fe}$  a  $\text{Ni}_2\text{Cr}$  jednoznačně prokázána a navíc je možné hovořit o dvou samostatných fázích. Z orientace spinů, odhadnuté ze spektra feromagnetické fáze, která je kolmá k povrchu, je možné si udělat představu o procesu tuhnutí vrstvy a růstu zrn.

## KOMISE

Komise pro spektroskopické metody monitorování životního prostředí

uspořádala ve dnech 5.-9.6.1989 v Janově n. Nisou 6. seminář, který navázal na tradici předchozích seminářů s tím, že jednotlivé bloky přednášek byly doplněny o panelové diskuze (celkem 6). Seminář byl poprvé věnován jak tradiční problematice analýzy anorganických látek (především prvků) v ovzduší, vodě, půdách a potravinách, tak problematice analýzy látek organických. Zatímco analytika a problematika atomová s dominujícím postavením atomové absorpční spektrometrie (AAS) a induktivně vázaného plazmatu (ICP) je metodicky plně zvládnuta a ověřena (hlavní pozornost zde byla věnována spolehlivosti a reprodukovatelnosti výsledků), je problematika analýzy organických škodlivin teprve v počátcích.

Z těchto důvodů bylo též společné setkání těchto dosti odlišných směrů pro obě skupiny užitečné a velmi prospěšné. Z obou stran byl seminář hodnocen velmi positivně a bylo dohodnuto, že ve společných seminářích bude pokračováno již pravidelně vždy po dvou letech.

RNDr. Miroslav Ryska

ČTYŘICET LET  
ČESkoslovenské  
ORGANIZOVANÉ  
SPEKTROSKOPIE  
1949 - 1989

40

## SOUTĚŽE ČS. SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI

přinesly v roce 1988 ocenění zajímavým pracem, z nichž daleje uvádíme alespoň stručná resumé. Měly by být podnětem pro další přihlášky do soutěže mladých spektroskopiků nebo do soutěže o nejúspěšnější aplikaci spektroskopických metod (podmínky soutěže sdělí vedoucí OS nebo sekretariát).

Jiřina Korečková, ÚCHSKM ČSAV, Praha, Jiří Pavelka, ÚSVU, Ostrava : Stanovení olova v mléce metodou atomové absorpční spektrometrie s použitím grafitové kyvety a platformové techniky

Olovo patří mezi sledované prvky posledních let v potravinách a surovinách živočišného původu, protože má schopnost kumulovat se v živých organismech a jeho působení na lidský organismus je označováno za toxicke.

Vypracovaná metoda pro stanovení nízkých obsahů olova v mléce bez předchozí mineralizace je založena na řeďení vzorků mléka (1+4) 0,01% roztokem Tritonu X-100 a na použití grafitové kyvety s platformou k odstranění uplatňujících se rušivých vlivů složité matrice vzorků. Metoda představuje výrazné zjednodušení dosud používané metody stanovení olova plamenovou AAS, pro kterou bylo třeba vzorky předem mineralizovat v muflové peci a vzniklý popel rozpouštět v kyselině chlorovodíkové.

Metoda elektrotermické atomizace stanovení olova v mléce přináší značnou časovou úsporu analýz, úsporu elektrické energie a snižuje nebezpečí kontaminace vzorků, čímž se významně zpřesňují analýzy.

Popsanou metodou byly analyzovány vzorky mléka z oblasti poměrně zatížených průmyslovou činností. Získané hodnoty se pohybovaly v rozmezí 0,015-0,030 mg/l Pb, což nepřesahuje povolený limit 0,1 mg/l Pb. Hodnoty jsou v dobré shodě s obsahy nalezenými např. v NSR a Francii.

J. Kvítek, Ústav jaderné fyziky ČSAV, Řež :  
Neutronový analyzátor bóru ve skle

Neutronový analyzátor je určen ke stanovení bóru ve skle a sklařském kmennu. Jeho princip je založen na změně transmise termálních neutronů procházejících analyzovaným vzorkem v závislosti na jeho obsahu bóru. Zdrojem termálních neutronů je radioaktivní zářič  $^{239}\text{Pu-Be}$  ( $5 \times 10^6$  neutronů/s) umístěný v polyetylénovém moderátoru. Neutrony jsou detegovány křemíkovým povlovičovým detektorem s povrchovou barierou opatřeným konvertem s tenkou vrstvou  $^6\text{LiF}$ . Kompaktní a vysoce stabilní elektronický trakt sestává z nábojového předzesilovače, lineárního tvarovacího zesilovače, integrálního diskriminátoru, čítače impulzů s timerem a napájecího zdroje. Tyto přístroje byly vyvinuty v ÚJF ČSAV. Kalibrace analyzátoru byla provedena pomocí standardů skla se známým obsahem boru určeným např. pomocí registrace záření gama z radiačního záchrny neutronů z reaktoru atomovými jádry  $^{10}\text{B}$ . Pomocí analýzy je možné stanovit obsah

bóru v rozmezí 0,5 až 10% s přesností lepší než 1,5%. Doba měření činí 30 minut.

Neutronové analyzátory se uplatnily především ve sklářském průmyslu. Podstatné zkrácení doby potřebné k provedení analýz ze dvou dní klasickou chemickou metodou na půl hodiny pomocí neutronového analyzátoru např. umožnilo výrobci nahradit přísadu kyseliny borité ve sklářském kmenu podstatně lacinější surovinou kolemanitem. Tímto způsobem se v závodě O3 Vertex Sklounion v Hodonících u Znojma, kde přístroj pracuje už od roku 1981, ušetřilo ročně cca 5 milionů devizových korun a na samotných analýzách bóru 200.000 Kčs. Neutronové analyzátory již několik let pracují také ve sklárnách Sklounion Litomyšl a Kavalier Sázava.

M. Miglierini, SVŠT EF KJFT, Bratislava : Použitie Mössbauerovej spektroskopie pri štúdiu magnetického usporiadania kovových skiel na báze Fe

Medzi perspektívne materiály, ktorých priemyselné nasadenie sa ešte len rozvíja, patria bezo sporu kovové sklá. Na pochopenie ich jedinečných vlastností je v súčasnosti aplikovaný mohutný arzenál makroskopických aj mikroskopických metód.

Predložený súbor prác je zameraný na použitie Mössbauerovej spektroskopie pri štúdiu štruktúrneho a hlavne magnetického usporiadania kovových skiel na báze Fe. Experimentálne merania boli vykonané v teplotnom intervalu od 77 do 300 K. Dôraz je kladený na zistenie mechanizmu rozšírenia spektrálnej čiary využitím nekonvenčnej metódy tzv. DISPA-plotov. Tá umožňuje analyzovať tvar čiary priamo z nameraných údajov. Na základe získaných výsledkov je navrhnutý spôsob aproximácie Mössbauerových spektier kovových skiel.

### VÝZVA K ÚČASTI NA MEZILABORATORNÍCH ANALÝZÁCH NOVÝCH RM

Komise pro stopovou analýzu Polského výboru analytické chemie při Polské akademii věd se na nás obrátila s prosbou, zda by se někteří naši analytici nemohli zúčastnit mezilaboratorních analýz za účelem atestace (certifikace) obsahů prvků v nových referenčních materiálech biologického původu:

Orientální tabákové listí (CTA-OTL-1)

Listí viržinského tabáku (CTA-VTL-2)

Oba nově vyvážené referenční materiály (RM) budou připraveny k rozesílání pro účastníky mezilaboratorních analýz během května až června 1989. Účast všech laboratoří, které se zabývají stanovením stop prvků je vítána. Každý účastník dostane vzorky a zároveň i nezbytné informace a formuláře pro shrnutí výsledků analýz. Po konečném vyhodnocení mezilaboratorní analýzy dostanou účastníci atest s "doporučenými" hodnotami koncentrací pro jednotlivé stopové prvky a další množství již atestovaného RM pro použití. Konečná zpráva o průběhu atestace bude publikována později v odborném časopise.

Kromě Komise pro stopovou analýzu jsou dalšími spoluorganizátory analýzy Ústav jaderné chemie a technologie z Varšavy a Ústav pro ochranu rostlin z Kostinbrodu (BLR).

Všichni zájemci o účast na mezilaboratorních analýzách si mohou zažádat o zaslání vzorků a dalších informací na adresu:

Prof.Dr.hab. R.Dybczynski  
Dept. of Analytical Chemistry  
Institute of Nuclear Chemistry and Technology  
ul. Dorodna 16  
03-195 Warszawa  
POLAND

Československým analytikům lze účast v tomto mezilaboratorním testu vřele doporučit, neboť bude znamenat nejen přínos v získání nedostatkových RM, ale i možnost otestovat si schopnosti a způsobilost laboratoře i používané analytické metody a postupy. To by mělo značnou měrou přispět ke zkvalitnění analytických výsledků získávaných ve zúčastněných laboratořích.

## INFORMACE

Firma C.Zeiss, Jena, má ještě na skladě několik posledních kusů spektrografov PGS 2, jehož výroba byla ukončena.

Případným zájemcům nabízí komplet sestávající z těchto částí :

Plangitterspektrograph PGS 2

Universal-Bogen-Impulsgenerator UBI 2

Laser Microspectral Analyzer LMA 10

Spektrenprojektor SP 3

Mikrodensitometer MD 100

Zájemci nechť se obrátí na zastoupení firmy C.Zeiss v Praze, Ing.Piehler, telefon 205 915

## Královské železárnny, n.p.

Králov Dvůr, 267 01 Beroun, mají zabudovaný spektrometr OBLF (NSR) a jsou nositeli servisu k těmto přístrojům. Zájemcům zprostředkuje prohlídku a konsultaci na pracovišti (Ing. Vlastimil Šilhavý, ved.odb.automatizace, tel. Beroun 2581-5).

## Státní restaurátorské ateliéry

Pohořelec 22, 118 00 Praha 1, odkoupí nebo pronajme UV/VIS spektrometr pro identifikaci barviv (tel. 2361454, Ing.Samobýlová).

## Připravované konference

8th International Conference on Fourier Transform Spectroscopy - Lübeck-Travemünde, 1. - 6.9.1991  
(informace : Gesellschaft Deutscher Chemiker, P.O.B. 90 04 40, D-6000 Frankfurt 90, BRD)

3rd International Conference on Near Infrared Spectroscopy - Brussel, Belgie, 25. - 29.6.1990  
(informace : Dr.Nicole Bartiaux-Thill, Agricultural Research Center, 22, avenue de la Faculté d'Agronomie, B-5800 Gembloux)

6. Tagung Festkörperanalytik, Karl-Marx-Stadt, 12.-15.6.1990  
(informace : TU Karl-Marx-Stadt, Sektion Chemie und Werkstofftechnik, Dr.L.Küchler, Postfach 964, DDR-9010 Karl-Marx-Stadt)

20th European Congress on Molecular Spectroscopy, Zagreb 26. - 30.8.1991  
(informace : prof.Z.Meič, Ruder Boškovič Inst., P.O.Box 1016, YU-41001 Zagreb)

4th European Konference on Applications of Surface and Interface Analysis, Budapest, 14.-18.10.1991  
(informace : L.Kövér, MTA ATOMKI, P.O.B. 51, H-4001 Debrecen)

XXVII.Colloquium Spectroscopicum Internationale, June 9. - 14.1991, Grieg Hall, Bergen, Norway  
(informace : XXVII CSI, HSD Congress-Conference, P.O.B. 1721 Nordnes, N-5024 Bergen)

## NABÍDKA PUBLIKACÍ

V sekretariátě Čs.spektroskopické společnosti je možno objednat :

Vybrané metody analytické atomové spektrometrie (skripta) (42,- Kčs)

4.symposium o fyzice povrchů (sborník přednášek) (310,- Kčs)

Škola hmotnostní spektrometrie (souhrny přednášek) (14,- Kčs)

11.pracovní seminář AAS (sborník abstrakt) (28,- Kčs)

Podzimní škola elektronové spektroskopie (sborník přednášek) (284,- Kčs)

