

Československá spektroskopická společnost

Bulletin

27

1977

Čs. spektroskopická spol.
při ČSAV
KNIHOVNA
Přirůstk. č. 140

24.schůze hlavního výboru Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV se konala dne 13. prosince 1977 v Národním technickém muzeu v Praze 7.

Schůzi řídil Dr.Josef Kuba, CSc.

Hlavní náplní schůze byla příprava volebního valného shromáždění, na kterém budou předneseny důležité zprávy, návrh změny organizační struktury Společnosti a zvolen nový hlavní výbor.

Volební valné shromáždění se konalo v Národním technickém muzeu dne 14. prosince 1977.

Jeho průběh řídil Dr.Josef Kuba, CSc.

Na programu byla především zpráva o činnosti Společnosti za minulé funkční období hlavního výboru, kterou přednesl vědecký tajemník Dr.Ivan Rubeška, CSc. Zpráva je uvedena v plném znění v další části Bulletinu.

Dále byl přednesen návrh na organizační změnu Společnosti, kterou valné shromáždění schválilo. Nová struktura Společnosti je podrobně uvedena v další části Bulletinu.

Po zprávě o hospodaření a zprávě revizní komise bylo uděleno absolutorium odstupujícímu hlavnímu výboru a byly provedeny volby výboru nového.

V další části zasedání byly předneseny přednášky Dr.Ivana Rubešky a prof.Ing.Eduarda Plška, ve kterých bylo zhodnoceno XX.Colloquium Spectroscopicum Internationale a 7.International Conference on Atomic Spectroscopy. Obě přednášky jsou uvedeny v závěrečné části Bulletinu. Je připojeno i několik kopií dopisů, které byly vybrány z těch, jež poslali členům organizačního a programového výboru zahraniční účastníci.

Organizační struktura

Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV

- Sekce optické atomové spektroskopie
předseda - Dr.Jan Mráz
- odborná skupina spektroskopie nevodivých materiálů
vedoucí - Dr.Jana Kubová
- odborná skupina spektroskopie kovů
vedoucí - Ing.Oldřiška Staňková
- odborná skupina absorpční a plamenové spektroskopie
vedoucí - Dr.Ivan Rubeška CSc
- odborná skupina laserové mikroanalýzy
vedoucí - Ing.Vladimíra Jánošíková
- odborná skupina automatické spektrometrie v hutnictví
vedoucí - Ing.Karel Kuboň CSc
- Sekce molekulové spektroskopie
předseda - Ing.Jaromír Moravec CSc
- odborná skupina spektroskopie s vysokým rozlišením
vedoucí - Doc.Dr.Dušan Papoušek DrSc
- odborná skupina elektronové spektroskopie a fotochemie
vedoucí - Ing.Miloš Nepraš CSc
- odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie
vedoucí - Doc.Dr.Ing.Jaro Komenda CSc
- odborná skupina spektroskopie pevného stavu
vedoucí - Dr.Milena Závětová CSc
- odborná skupina vibrační spektroskopie
vedoucí - Dr.Bohuslav Strauch CSc

Sekce speciálních spektroskopických metod

předseda - Ing.Václav Hulínský CSc

odborná skupina rentgenové spektrometrie
vedoucí - Dr.Jaroslava Waňková CScodborná skupina lokální elektronové mikroanalýzy
vedoucí - Ing.Václav Hulínský CScodborná skupina hmotové spektrometrie
vedoucí - Dr.Miroslav Ryska CScodborná skupina instrumentálních radioanalytických metod
vedoucí - Ing.Miloslav Vobecký CScodborná skupina Mössbauerovy spektroskopie
vedoucí - Ing.Jozef Sitek CScodborná skupina spektroskopie elektronů
vedoucí - Dr.Dušan Štulík

Komise názvoslovná

vedoucí - Doc.Dr.Ing.Bohumil Polej CSc

Komise školská

vedoucí - Dr.Milan Horák CSc

Komise přístrojová

vedoucí -

Komise pro standardy a referenční materiály

vedoucí - Ing.Karel Bičovský

Hlavní výbor

Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV

předseda :

RNDr.Josef Kuba CSc

I.místopředseda :

prof.Ing.Eduard Plško DrSc

II.místopředseda :

Doc.Ing.Jindřich Lego CSc

vědecký tajemník :

RNDr.Ivan Rubeška CSc

hospodář :

Ing.Zdeněk Kosina

předseda sekce optické atomové spektroskopie :

RNDr.Jan Mráz

předseda sekce molekulové spektroskopie :

Ing.Jaromír Moravec CSc

předseda sekce speciálních spektroskopických metod :

Ing.Václav Hulínský CSc

referent pro zahraniční styky :

Doc.Dr.Ing.Zbyněk Ksandr CSc

referent pro komise :

RNDr.Milan Horák CSc

redaktor

RNDr.Bedřich Moldan CSc

revizní komise :

Ing.Dana Kolihová CSc

Ing.Ondrej Filo

RNDr.Alena Špačková CSc

členové hlavního výboru :

Ing. Zdeněk Čížek

Ing. Miloslav Pisárčík CSc

Ing. Vladimír Streško CSc

Ing. Vratislav Svoboda CSc

RNDr. Václav Sychra CSc

Ing. Ivo Šlár

Ing. Ján Šustek CSc

RNDr. Miroslav Vida CSc

I. R u b e š k a : Zpráva o stavu a činnosti
Československé spektroskopické společnosti za léta 1974-1977

Toto období je svým způsobem vyjimečné, neboť zahrnuje čtyři místo tří let, která jsou obvyklým funkčním obdobím výboru. V minulém roce bylo Valným shromážděním schváleno prodloužení činnosti výboru o rok vzhledem k organizování XX. Colloquia Spectroscopica Internationale a 7. International Conference on Atomic Spectroscopy.

Uplynulé čtyřleté období je ohraničeno dvěma význačnými událostmi. V dubnu 1974 byla V. čs. spektroskopická konference v Havířově a v srpnu a září zmíněné XX. CSI a 7. ICAS. Během tohoto období se Společnost rozrostla z 264 kolektivních členů v roce 1973 na 296 v roce 1977. Ještě výraznější byl růst individuálních zástupců ze 719 v roce 1973 na 1002 v roce 1977.

V průběhu této doby doznaly změny i některé odborné skupiny. V roce 1974 vznikla odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie místo odborné skupiny radiofrekvenční spektroskopie a v roce 1975 odborná skupina vibrační spektroskopie místo odborné skupiny chemické spektroskopie a nová komise pro standardy a referenční materiály.

Předsednictvo hlavního výboru se v těchto letech pravidelně scházelo zhruba v třínedělních intervalech a dobře fungoval i sekretariát v osobách P. Vampolové a Ing. K. Goldsteinové.

Vědecko-odborná činnost

V průběhu uplynulých čtyř let se vědecko-odborná činnost Společnosti stabilizovala na úrovni zhruba 18 pracovních schůzí a 9 seminářů, kurzech či letních školách ročně. Přednese se přes 250 odborných přednášek ročně (z toho něco přes 10 bývá přednášek zahraničních hostů). Akcí Společnosti se zúčastňuje sumárně okolo 1400 účastníků ročně. Tato čísla jsou jistě impresivní, málokterá společnost se může vykázat tak rozvětvenou činností a tedy po kvantitativní stránce - to je ta, která se uvádí v hlášeníh ČSAV, můžeme být spokojeni. Můžeme být však spokojeni i po kvalitativní stránce ?

Poskytujeme všem svým členům maximum informací, o které by mohli mít zájem? Staráme se o jejich růst, jejich informovanost v nových oborech spektroskopie? V tomto směru bychom, soudím, mohli naši činnost zlepšit.

Společnost ve svých dvou sekcích má celkem 15 odborných skupin, 8 v atomové sekci a 7 v molekulové sekci. Velikost těchto odborných skupin je velmi rozmanitá a pohybuje se od 279 členů odborné skupiny plamenové spektroskopie do 32 členů odborné skupiny Mössbauerovy spektroskopie. I když členění do specializovaných pracovních skupin je jistě správné, neboť na této úrovni si členové mohou nejspíše vyměňovat praktické zkušenosti, není však zcela na místě, pokud se činnost členů omezuje pouze na pracovní schůze těchto odborných skupin. Tak se stává, že např. některých pracovních schůzí s velmi hodnotným programem se zúčastní pouze 10 - 15 členů.

V atomové sekci se obvykle konají i schůze sekce, na kterých bývá zařazen program širšího zájmu - na tyto schůze jsou zváni členové všech odborných skupin sekce a mohou tak vyslechnout i přednášky z jiných oborů.

Bohužel v molekulové sekci se schůze sekce nekonají, ač by se snad našla témata, jež by zajímala ne-li všechny, tak alespoň většinu odborných skupin. Měli bychom se tedy pokusit zvýšit odborný zájem o schůze sekcí volbou aktuálních atraktivních temat. Schůze by se mohly konat jednou ročně na témata zajímavější více odborných skupin. Vyžaduje to ovšem lepší a aktivnější spolupráci mezi předsedou sekce a vedoucími jednotlivých odborných skupin i větší ochotu ze strany přednášejících zaměřit a upravit svoje přednášky k zvolené problematice. Pořádání schůzí v sekcích s větším počtem účastníků by přineslo nejen větší užitek a efekt ve vědecko-odborné činnosti společnosti, ale současně by usnadnilo a zjednodušilo administrativní činnost. Doufáme, že k tomuto cíli přispěje i nové organizační členění Společnosti.

Činnost školicí

Školicí činnost - snaha o zvyšování odborné úrovně členů na všech úrovních je jedním ze základních úkolů Společ-

nosti. Je možno konstatovat, že počet kurzů a letních škol pořádaných Společností v posledních letech roste. Tak v oboru atomové spektroskopie probíhá každoročně (ve spolupráci s Dozem techniky Ostrava)

Kurz automatické spektrometrie určený pro začínající vysokoškoláky a pro techniky s praxí ;
v letech 1975 - 1976 proběhl Kurz praktické spektroskopie ;
v roce 1976 Kurz rentgenové spektrometrie ;
v roce 1974 Letní škola elektronové mikroanalýzy a řádkovací elektronové mikroskopie.

V oboru molekulové spektroskopie
v roce 1974 Letní škola vibrační spektroskopie krystalů
v roce 1975 Letní škola infračervené spektroskopie molekul
v roce 1977 Kurz měření vibračních spekter.

I když tuto činnost lze rovněž označit za bohatou nejsme si jisti, že pořádané kurzy plně pokrývají potřeby a požadavky praxe. Proto se Hlavní výbor rozhodl pověřit školskou komisí, která je seznámena s učebními osnovami vysokých škol v oboru spektroskopie, aby pro nadcházející období vypracovala komplexní plán školicích akcí - kurzů i letních škol na roky 1978 - 80, který by vycházel z učebních osnov i potřeb praxe. Tím by se školicí činnost Čs. spektroskopické společnosti maximálně zefektivnila. Při realizaci tohoto plánu se ovšem budeme nadále obracet na jednotlivé pracovníky Společnosti s žádostí o zorganizování toho či onoho kurzu a doufáme, že nám v této snaze budete nápomocní.

Činnost ediční

V období 1974 a 1977 vyšlo pouze 7 čísel Bulletinu, což je méně než 2 čísla ročně. Je to určitá regrese oproti předcházejícím letům vyvolaná obtížemi se zajišťováním tisku. Je zřejmé, že zprávy vycházející v Bulletinu ztrácejí rychle na aktuálnosti a jejich význam klesá exponenciálně s časem. Proto se Hlavní výbor rozhodl vytvořit funkci redaktora, který by byl členem předsednictva tak, aby všechny otázky spojené s vydáváním Bulletinu mohly být operativně řešeny.

Vedle Bulletinu byla pro jednotlivé kurzy, letní ško-

ly a semináře vydána skripta, jež jsou v řadě případů ještě v sekretariátě k dispozici. Jsou to skripta pro :

- a) Kurz praktické spektroskopie
- b) Letní škola elektronové mikroanalýzy
Letní škola infračervené spektroskopie molekul
- a sborníky přednášek :
 - a) plenární přednášky V.čs. spektroskopické konference
 - b) Optimalizace elektronické trasy v gama spektrometrii
 - c) abstrakta IAA 74, IAA 75, IAA 76, IAA 77.

Činnost komisí

Ze čtyř komisí se aktivně projevovala Komise pro standardy a referenční materiály - což je odrazem neustále rostoucího významu referenčních materiálů pro instrumentální analytiku. V uplynulém období proběhlo několik schůzí věnovaných problémům referenčních materiálů. Přístrojová komise pak aktivně spolupracovala při organizaci výstavy "Spectroscopy 77". Vedle toho průběžně poskytovala informace zájemcům o přístrojovou techniku.

Názvoslovná komise v uplynulém období nevydala žádné materiály. Přípravuje se však český překlad názvosloví IUPAC v oboru rtg spektroskopie jakož i definitivní názvosloví v oboru optické emisní spektroskopie a plamenové spektroskopie a atomové absorpční spektroskopie, které vyšly v Bulletinu jako návrhy v roce 1972 a 1973. Definitivní názvosloví bude uveřejněno v Chemických listech. Pokud by měl kdokoliv připomínky k publikovanému návrhu názvosloví prosím, abyste je co nejdříve zaslali na sekretariát nebo přímo Doc. Polejovi na VŠCHT.

Doufáme, že činnost školské komise se oživí i novou náplní.

Závěrem je podle mého soudu možno konstatovat, že odborná činnost Společnosti byla dobrá, úkoly, které Společnost má plnila úspěšně. Je mou povinností poděkovat všem funkcionářům, vedoucím odborných skupin Společnosti i všem řadovým členům, kteří se aktivně podíleli na akcích Společnosti, za jejich iniciativu a práci, kterou se zasloužili o úspěšnou činnost Společnosti. Doufáme, že navrhované změny v organi-

zační struktury, tj. zřízení 3 sekcí místo dvou a vypracování tříletého plánu kurzů a letních škol přispějí k zvýšení efektivnosti naší činnosti.

Děkuji za pozornost.

I. R u b e š k a , Ústřední ústav geologický, Praha :
Zpráva o průběhu a zhodnocení XX.C.S.I. a 7.I.C.A.S.

Ve dnech 30.8. - 3.9.1977 se konalo v Praze pod záštitou místopředsedy vlády ČSSR s. M. Lúčana XX.C.S.I. (Colloquium Spectroscopicum Internationale) a 7.I.C.A.S. (Mezinárodní konference atomové spektroskopie). Pořadatelem akce byla Československá spektroskopická společnost při ČSAV a Vysoká škola chemicko-technologická v Praze. Kongres byl slavnostně zahájen dne 30.8.1977 v 9 hod. ve Sjezdové hale PKOJF za přítomnosti místopředsedy vlády ČSSR s. M. Lúčana a dalších stranických a vládních představitelů. První den jednání pokračoval šesti plenárními přednáškami a diskuzí a dále setkáním národních delegátů zúčastněných zemí. Další dny (31.8.-3.9.) pokračoval kongres jednáním v sekcích v areálu fakulty strojní a elektrotechnické ČVÚT v Praze 6. Souběžně s kongresem probíhala výstava přístrojů a zařízení pro spektroskopii "Spectroscopy 77", pořádaná agenturou "Made in publicity" ČTK, které se zúčastnilo 26 předních světových firem a výstava v Národním technickém muzeu "Spektroskopie včera a dnes". Pražská část zasedání byla zakončena v sobotu 3.9. ve 12 hod. Ve dnech 5. - 7.9.1977 pokračoval kongres formou šesti monotematických symposií na různých místech ČSSR.

Pražské části zasedání se zúčastnilo celkem 879 registrovaných delegátů, z toho 281 z ČSSR a 598 z dalších 27 zemí (484 ZST, 393 KS a 2 RZ). Symposií se zúčastnilo celkem 510 delegátů, z celkového počtu 879 v Praze registrovaných účastníků.

V rámci odborného programu bylo na XX.C.S.I. a 7.I.C.A.S. (včetně symposií) předneseno 6 plenárních přednášek, více než 50 vyzvaných přednášek a téměř 500 původních sdělení prakticky ze všech oborů spektroskopie. Plenární přednášky byly věnovány pokrokům v oboru vibračně-rotální molekulové spektroskopie s vysokým rozlišením (M.R. Aliev, SSSR), v oboru lokální mikroanalýzy (O. Brümmer, NDR), v oboru spektroskopie elektronů (V. Čermák, ČSSR) v oboru stopové analýzy a mikroanalýzy biologických materiálů (G.H. Morrison, USA) a bezdisperzních systémů v atomové spektroskopii (A. Walsh, Austrálie)

Jedna plenární přednáška (J. Robin, Francie) byla věnována budoucnosti mezinárodních konferencí v oboru spektroskopických disciplin a sloužila jako úvod k diskuzi o organizaci konferencí C.S.I. a I.C.A.S. v příštích letech.

Vyzvané přednášky a původní sdělení byla přednesena na 68 sekcích probíhajících ve dnech 31.8. - 3.9. v Praze (současně probíhalo 8 - 14 paralelních sekcí) a na 6 symposiích 5. - 7.9. mimo Prahu. Symposia byla zaměřena monotematicky na aktuální otázky v jednotlivých oborech. V menších kolektivních specializovaných odborníků, kteří se zúčastnili jednotlivých symposií, mohly být problémy diskutovány mnohem důkladněji a do hloubky. Tím symposia vytvářela protiváhu k extenzivnímu programu pražské části kongresu. Tento kontrast působil velmi příznivě a zdá se, že monotematická symposia se stanou pravidelnou součástí C.S.I. a I.C.A.S.

Hodnocení přínosu kongresu v jednotlivých spektroskopických oborech.

Nejpočetněji byl zastoupen obor optické emisní spektroskopie (OES), celkem 26,3% všech přednášek, hlavním trendem byla snaha a snížení meze důkazu jednotlivých prvků využíváním nových analytických zdrojů záření. Nejvíce diskutovaným typem bylo nesporně indukčně vázané plazma (ICP), jemuž byly věnovány tři půldenní sekce. Oproti některým nekriticky optimistickým prognosám z dřívějších konferencí se objevilo realističtější hodnocení ICP z hlediska možnosti výskytu interferencí. Vyskytly se i práce diskutující mechanismus excitace prvků v ICP, jež ukazují na netermický mechanismus. Celkem však konference jasně ukázala velké a dosud nevyužité možnosti, které zavedení ICP do OES otevřelo pro expeditivní mnohaprvkové stanovení stopových prvků. Na druhé straně se nesplnily předpovědi o využitelnosti Grimmovy výbojky pro stopovou analytiku. Na jednání v tomto oboru navazovala Symposia I a II.

Symposium I (Štrbské pleso, ČSSR 33 úč., zahr. 109 úč.) věnované optimalizaci spektrochemických analytických metod se zabývalo více "klasickými zdroji" tj. obloukem, i když v různých úpravách k snížení mezí postřehu např. magneticky

stabilizovaný stejnoměrný oblouk v grafitové trubici a pod.

Symposium II. (Hradec nad Moravicí, ČSSR 38 úč., zahr. 38 úč.) bylo naproti tomu zaměřeno na zajištění vysoké informační obsažnosti na využití analytických dat pro přímé řízení technologických procesů v souvislosti s automatizací.

V oboru absorpční a fluorescenční spektroskopie (19% přednášek) se neobjevily žádné nové instrumentální principy. Rozšiřuje se využití AAS jako specifického detektoru pro kovy ve spojení s plynovou či kapalinovou chromatografií. To má význam zejména při kontrole znečištění životního prostředí, protože toxicita často závisí na formě vazby prvku - klasickým příkladem je rtuť vázaná organicky nebo anorganicky.

Největší pokrok se projevil ve znalostech procesů probíhajících při atomizaci prvků v elektrotermických atomizátorech. Tomuto tématu bylo věnováno Symposium III (Chlum u Třeboně, ČSSR 54 úč., zahr. 79 úč.). Ukazuje se, že na atomizaci má velký vliv nejen reakce probíhající v pevné fázi mezi jednotlivými složkami, ale i reakce v plynné fázi pokud při atomizaci stanovovaného prvku dochází současně k rozkladu a uvolňování složky, která se stanovovaným prvkem může reagovat.

Typickým rysem v oboru rentgenové spektroskopie (12%) bylo výrazné zastoupení referátů z oblasti základního výzkumu, jež se týkaly interpretací emisních pásů a absorpčních spekter v blízkosti hrany, interpretací rentgenových a Augerových rezonančních přechodů, teorii satelitů rtg spekter, které nabyly na významu v souvislosti se studiem srážek atom - ion při vysokých energiích. Převážná část přednášek v oboru klasické XRF metody byla věnována otázkám matematických metod korekce matričních efektů, nebyly však předneseny žádné zásadně nové korekční postupy. Běžné použití energetické disperze v průmyslové praxi prokázala řada referátů, z nichž nejzajímavější, referát H. Aigingera (Rakousko) pojednával o snížení detekčního limitu redukcí pozadí za použití polarizovaného primárního rtg záření.

Symposium IV (Žďár nad Sázavou, ČSSR 32 úč., zahr. 23 úč.) bylo tematicky zaměřeno na otázky vlivu chemické vazby na rtg spektra a možnosti využití k analytickým účelům. Tento pokus o vytyčení problematiky formou řízené diskuze ukázal, že v současné době lze metodami rtg spektroskopie určit vazbu jen v jednoduchých systémech. Možnosti kvantitativního stanovení poměru obsahu prvku v různých typech vazby na základě proměření tvaru a polohy rtg emisních pásů resp. absorpčních hran jsou principiálně možné.

V oboru Augerovy spektroskopie (0,8%) byly předneseny referáty zabývající se studiem povrchových vlastností pevných látek a určení atomových a jaderných charakteristik. Významným příspěvkem, který otevírá zcela nové pole využití Augerovy spektroskopie, bylo pojednání prof. Groenevelda o spektrometrii Augerových elektronů po kolisích s těžkými ionty v molekulárních a atomárních systémech.

Účast v oboru elektronové a iontové lokální mikroanalýzy (3,2%) byla narušena tematicky stejně zaměřeným kongresem, který proběhl těsně před zahájením CSI v Bostonu USA. Proto byla účast poněkud nižší než jsme očekávali.

V oblasti elektronové lokální mikroanalýzy je pozornost zaměřena na zpřesnění kvantitativní analýzy pomocí dokonalejších srovnávacích vzorků, pomocí nových výpočetních metod, které postihují "neideální systémy" jako jsou tenké vrstvy, mikroheterogenní systémy, volné částice atp.

V iontové mikroanalýze je vývoj veden snahou o kvantifikaci hmotových spekter přiřazením správných koncentrací měřeným intenzitám a vyloučením rušivých vlivů jako jsou tvorba clustrů, chemické reakce mezi primárními ionty a zkoumaným materiálem a pod.

Vynikajícím referátem v oboru hmotové spektrometrie (3,4%) byla vyzvaná přednáška prof. Durupa (Francie), Threshold Photo-dissociation and Predissociation of Diatomic Ions. Největší počet původních sdělení se týkal analytického využití hmotové spektrometrie s jiskrovým zdrojem při analýzách pevných látek.

V oboru vibrační a elektronové molekulové spektroskopie byl přihlášen značný počet přednášek (14%), které byly utříděny

do několika tematicky ucelených sekcí : přednášky týkající se elektronové spektroskopie, elektronových vibračních spekter kovových komplexů a chelátů a vibrační spektroskopie tuhé fáze.

Navazující Symposium VI (Nové Město na Moravě, ČSSR 11 úč., zahr. 46 úč.) bylo zaměřeno na problémy luminiscence organických sloučenin, mechanismus nezářivých procesů, aplikaci laserů a aplikace kvantové chemie při interpretaci elektronických spekter.

Předností zasedání v oboru magnetické rezonanční spektroskopie (9,1%) bylo početné zastoupení předních pracovníků světové úrovně. Temata úvodních přednášek se týkala aktuálních trendů v rozvoji metod (R.R.Ernst, Švýcarsko : Dvourozměrná NMR spektroskopie, A.Bothner-By, USA : Vývoj NMR spektrometru s měřicí frekvencí 600 MHz s perspektivní aplikací pro studium biopolymerů). Současné aplikační směry se vyznačují především zájmem o studium dynamiky a anisotropie vnitřních pohybů a aplikace NMR spektroskopie vysokého rozlišení v pevném stavu. Navazující Symposium V (Brno, ČSSR 28 úč., zahr. 28 úč.) bylo zaměřeno na aplikační možnosti posunových čidel v NMR spektroskopii a problémy elektronové paramagnetické rezonance.

V sekcích věnovaných spektroskopii pevného stavu (7,3%) se sešly referáty z různých oborů spektroskopie. Jednotlivé tematické celky byly zaměřeny na : formy sloučenin v pevných látkách, elektronová spektra pevných látek, absorpční a luminiscenční spektra pevných látek, modulační spektroskopii. Hlavním přínosem byly vyzvané přehledné referáty přednesené předními odborníky, v nichž se účastníci měli možnost seznámit nejen s novými výsledky studia pevných látek spektroskopickými metodami, ale i s novými přístroji a aplikacemi.

V oboru instrumentálních radioanalytických metod (3%) převažovaly práce zaměřené na neutronovou aktivační analýzu ve spojení se spektrometrií záření gamma i charakteristického rtg záření. Vedle základních otázek detekce záření byly řešeny i problémy analytické aplikace širšího výzkumného rozsahu.

V oboru Mössbauerovy spektroskopie (2,2%) převládaly přednášky aplikačního charakteru, zejména ve fyzikální metalurgii a chemii. S rozvojem metodiky a jejím použitím ve fyzice pevných látek se Mössbauerova spektroskopie uplatňuje i při zkoumání vlastností materiálů.

Odborný program jak pražského zasedání tak i symposií proběhl bez závad; technické zajištění bylo dokonale připraveno. Předsedové jednotlivých sekcí byli předem vybráni z význačných zahraničních pracovníků a spolu se sekretáři sekcí z řad československých pracovníků se starali o hladký průběh sekce, dodržování časového harmonogramu a stimulování odborné diskuze k předneseným referátům. Odborný program lze hodnotit jako úspěšný, neboť se do něho podařilo zahrnout prakticky všechny spektroskopické disciplíny na úrovni současné světové vědy. Netradiční disciplíny, jež bývají na konferencích Colloquia Spectroscopica Internationale zastoupeny slaběji, se podařilo posílit vyzvanými řečníky z řad špičkových světových odborníků.

Extenzivní odborný program umožnil všem členům Československé spektroskopické společnosti se kongresu aktivně zúčastnit; odborné diskuze a osobní kontakty se špičkovými světovými odborníky budou mít nesporně stimulační vliv pro rozvoj spektroskopie v ČSSR.

V průběhu XX.C.S.I. a 7.I.C.A.S. proběhla jako obvykle i schůze národních delegátů, která měla rozhodnout o místu konání přespříštího, tj. XXII. C.S.I. Vedle této otázky jsme dali na program i otázku tematického zaměření konference, zejména vztah C.S.I. a I.C.A.S. a otázku účasti atomové i molekulové spektroskopie, dále otázku složení tzv. Continuation committee, tj. skupiny lidí, která se stará o předávání štafety (neboť na rozdíl od jiných mezinárodních konferencí C.S.I. ani I.C.A.S. nemají trvalý sekretariát)

Schůze za účasti delegátů 18 zemí rozhodla, že

- 1) XXII.C.S.I. se bude konat spolu s 9.I.C.A.S. v Tokyu v roce 1981;
- 2) konference má být zaměřena analyticky, tj. na práce z analytického využití spektroskopie a na teoretické práce na-

pomáhajúci analytickému využitiu - a to jak z oboru atomové tak i molekulevej spektroskopie.

V souvislosti s podtržením analytického zaměření a s návrhy na trvalé spojení C.S.I. a I.C.A.S. bylo doporučeno od roku 1983 zahájit novou serii konferencí s novým názvem. Návrhy byly dva :

CSAI - Colloquium Spectroscopicum Analyticum Internationale
 ICAS - International Conference on Applied Spectroscopy
 Rozhodnutí by mělo padnout v Cambridge.

K otázce složení Continuation committee bylo rozhodnuto, že nebudou žádní trvalí členové, ale že bude složeno z minulého, současného a budoucího presidenta konference (Kuba, Bills, Fuwa a z předsedy komise V/4 IUPAC - Robin).

Závěrem bych chtěl říci, že s průběhem konference můžeme být spokojeni. Je mou povinností, jako předsedy programového výboru, poděkovat VŠCHT a zejména rektorovi prof. J. Mosteckému, který se ujal funkce předsedy organizačního výboru a vahou své autority pomohl zajistit řadu úkolů. Dále musím poděkovat pracovníkům VŠCHT, kteří úkoly dostávali z první ruky a nesmím zapomenout ani na ostatní členy naší Společnosti, kteří pracovali v různých funkcích v organizačním a programovém výboru či v organizačních výborech symposií. Jen díky nadšené a obětavé práci všech se podařilo průběh všech součástí kongresu zajistit tak, že tato významná mezinárodní akce přispěla k dobré reprezentaci československé spektroskopie, naší vědy a tím i Československé socialistické republiky ve světě.

Děkuji Vám za pozornost.

E. P l š k o , Geologický ústav PF UK, Bratislava :
Niekoľko hodnotiacich postrehov z XX.Medzinárodného spektroskopického kolokvia a 7.Medzinárodnej konferencie o atómovej spektroskopii.

Vážení čitatelia dovoľte, aby som i touto cestou podal niekoľko uprimných a neformálnych postrehov hodnotiacich XX.CSI a 7.ICAS v Prahe.

Hodnotenie tohto bezpochyby významného podujatia s určitým časovým odstupom však má svoje kladné stránky, vyplývajúce zo skutočnosti, že už sa rozplynulo prvotné nadšenie vyplývajúce z bezprostredného stretnutia s mnohými domácimi i zahraničnými spektroskopikmi, ktoré by mohlo ovplyvniť objektívnosť podávaného rozboru. Okrem toho som mal medzičasom možnosť počuť i ďalšie postrehy, pripomienky, resp. názory, ktoré rozširujú a zevšeobecňujú platnosť urobených uzáverov.

Pražské kolokvium bolo už jedenáste, ktorého som sa zúčastnil, takže mám i sám možnosť širokého porovnania. Na dvoch CSI, tj. v Madride a Grenobli som mal plenárny referát, na jednom (Heidelberg) som uvádzal súhrnnou vyzvanou prednáškou a vo Florencii som viedol panelovú diskusiu. Okrem toho som v Prahe predniesol, resp. bol spoluautorom 3 prednášok a predtým 5 referátov na rôznych CSI, takže som i určitým spôsobom nie len oprávnený ale aj zaviazaný využiť svoje doterajšie skúsenosti k vyvodu niektorých záverov o tomto našom podujatí.

Popri odbornej činnosti v rámci CSI som sa od roku 1963 (Beograd) zúčastňoval ako československý národný delegát príslušných zasadnutí. Ihneď od tejto doby som propagoval spolu s ďalšími čs. spektroskopikmi myšlienku zorganizovania tohto vrcholného spektroskopického podujatia v ČSSR. Pre túto myšlienku sme robili potrebné prípravy v rôznych vystúpeniach na viacerých zasadnutiach národných delegátov i v osobných kuloárnych rozhovoroch. Celá situácia dozrela do takej úrovne, že vo Florencii naša delegácia požiadala oficiálne o udelenie možnosti organizovania CSI v ČSSR. Napriek rôznym, možno povedať až intrigánskym snahám procedurálneho zmarenia tohto snaženia bol návrh veľkou väčšinou hlasov prijatý. Ihneď po tomto

rozhodnutí sa však našli i v ČSSR pracovníci, ktorých názor bol, že sa u nás podobné podujatie organizovať nemá. Napriek tomu sa Čs. spektroskopická spoločnosť plne zapojila do príprav CSI a možno s plnou zodpovednosťou vyhlásiť, že sa urobili všetky potrebné zásadné opatrenia k zabezpečeniu zdarného priebehu tohoto veľmi náročného a zodpovedného podujatia.

Dovolím si teraz, ako člen organizačného i programového výboru i ako jeden z najinformovanejších domácich účastníkov, zhodnotiť všetky spozorované klady i nedostatky XX.CSI a 7.ICAS.

Sústredenie plenárnych referátov na prvý deň bolo väčšinou účastníkov veľmi kladne hodnotené. V tomto smere bol kladne hodnotený aj výber tém a pozvaných rečníkov. Osobné sympatie sa získali i tým, že na zahájení prehovoril zakladateľ CSI Dr.E.Loewille. Táto okolnosť ihneď na začiatku odzbrojila mnohých pripravených "kritikov", čím sa ukázala ako takticky veľmi dobre volené rozhodnutie. Tiež rámec zahájenia v Zjazdovom paláci prispel ku celkovému dobrému dojmu.

Panelovú diskusiu o ďalšej organizácii medzinárodných spektroskopických konferencií, ktorej vedením som bol poverený, som sa snažil zamerať tak, aby čo možno najviac prispela ku rozhodnutiam za ňou nasledujúceho zasadania národných delegátov. V diskusii vystúpilo veľa významných odborníkov s podnetnými návrhmi. Prekvapujúcim však bol výrazný nezáujem mladšej spektroskopickéj pospolitosti o ďalšie osudy spektroskopických konferencií, prejavenej totálnou neúčastou, na ktorú okolnosť sa i výslovne poukázalo.

Na základe získaných podkladov bolo možné viesť stretnutie národných delegátov vecne a krátko. Nebolo ťažké dosiahnuť jednotu názoru v tom, že kolokvia, ktoré by v budúcnosti mali splynúť s ICAS, sa majú venovať otázkam chemickej, snáď ešte užšie povedané analytickej aplikácii spektroskopie. Toto, podľa mňa správne omedzujúce kritérium ďalšieho zamerania tohto podujatia však do určitej miery predstavuje kritiku našej organizácie kolokvia venovaného veľmi širokej problematike, ktorú častokrát spolu viaže ledva to spoločné slovo "spektroskopia".

Na zasadnutí národných delegátov ani neboli také

problémy s určením miesta ďalšieho konania i keď niektorí delegáti sa cítili zaskočení pozvaním Japonska, kde bude ICAS, čo sa však uviedlo na správnu mieru, ako s jednoznačným odmietnutím niektorých snáh o prenesenie ťažiska diskusie do oblasti procedurálnej, spojenej so zaistením možnosti účasti spektroskopikov zo všetkých krajín sveta. Pri riešení tejto problematiky sme však na základe jednoznačného vysvetlenia a zhodnotenia situácie dosiahli silnú podporu delegátov z veľkej väčšiny zúčastnených krajín.

Odozvy mnohých účastníkov na zasadnutie národných delegátov boli veľmi kladné, najmä čo do vecností priebehu tohto vopred starostlivo pripraveného zasadania.

Čo sa týka priebehu odborného programu - účastníci, s ktorými som diskutoval, hodnotili kladne spôsob uvádzania zasadania vyžiadanými zhrnujúcimi prednáškami, ktorých úroveň bola ozaj veľmi dobrá. Menej však boli účastníci nadšení značným počtom zmien v programe, ktoré však bežali plne mimo možností organizátorov. V ich silách však malo byť prehľadnejšie informovanie. Na informovanie v tomto prípade o miestach zasadania jednotlivých sekcií sa taktiež sťažovali viacerí účastníci. Súvisí to zrejme s obrovským, dosiaľ nevídaným rozsahom tematiky zahrnutej do CSI, čo viedlo k vytvoreniu enormného množstva paralelných zasadaní. Taktiež viacero oprávnených poznámok padlo na úkor informácie o mieste konania CSI. Od námestia VŘSR malo byť snáď lepšie značenie. Účastníci ubytovaní v niektorých hoteloch (konkrétne Olympic) mali zaistený odvoz, čo bolo vysoko hodnotené. Mnohí z účastníkov, najmä v prvé dni však o tejto možnosti žiaľ nevedeli. Z niektorých ďalších hotelov (Vítkov) táto možnosť nebola, hoci od Olympicu odchádzali autobusy poloprázdne. Z hľadiska prístupu organizátorov ku účastníkom bol okrem organizovaného odvozu z hotela za asistencie ZNB zaručujúcej jeho rýchlosť a bezpečnosť tiež vysoko hodnotený príjem a privítanie na letisku, kde zahraniční účastníci ihneď obdržali potrebné informácie.

Okrem programu odborného je potrebné vysoko hodnotiť i snahu organizátorov o poskytnutie veľmi hodnotného programu spoločenského. Napriek týmto dobrým snahám nedopadol bufet

v prvý deň a garden party vo Valdštejnskej záhrade plne podľa predstáv organizátorov. Všetci účastníci však hodnotili v superlatívoch výlet na hrady a picnic v Rabyni. To bolo ozaj po každej stránke vydarené podujatie.

Slávnostná večera bola väčšinou účastníkov hodnotená kladne po stránke spoločenskej i napriek tomu, že poskytnuté služby neboli adekvátne zaplatenej cene. Vystúpenie orchestra K.Vlacha, spojené s možnosťou tanca, dalo večeru veľmi dobrý rámeček.

Ku dámskému programu : Ako najhodnotnejšie podujatie možno považovať módnú prehliadku na terasách Barrandova. Tam išlo všetko podľa programu. Predstavenie podnikov i doprovod probiehal v 4 cudzích jazykoch a výsledok predvedenia našej módy a odevovej kultúry bol vysoko kladný. Návšteva exkluzívnych obchodov už nenašla u účastníčok tak kladnú odozvu.

Čo sa týka prehliadky mesta, v tejto ČEDOK neposkytol príslušné služby zodpovedajúce reálne uvažovanej cene. Tiež výklad nebol na dostatočnej úrovni. Organový koncert, ktorý bol sám o sebe veľmi hodnotný, započal značným oneskorením, ktoré sprievodcovia ČEDOK-u tlmočili cudzojazyčne všetkým zahraničným účastníčkam ako spôsobené organizátormi CSI s tým, že ČEDOK na tom nenesie vinu. Sám však neviem čím to mohli organizátori zapríčiniť.

Čo sa týka cien všetkých služieb poskytovaných ČEDOKOM, boli tieto jednoznačne hodnotené ako enormne vysoké, vzhľadom na poskytnutú kvalitu. Je to veľmi dôležité konštatovanie zapadajúce zo sféry ekonomickej do sféry politickej. Z uvedeného vyplýva i názor mnohých účastníkov, ktorý zdieľam i ja sám, že podobné medzinárodné vedecké podujatia je nutné v budúcnosti organizovať čo najlacnejšie, napr. vo vysokoškolských centrách bez dôrazu na turisticky zárobokové hľadisko, keďže se jedná o podujatia vedecké a nie rekreačné.

Poslednou pripomienkou by ešte bola otázka sympózií. Napriek mojmu povodnému odmietavému stanovisku ku organizovaniu týchto podujatí musím konštatovať, že účastníci všetkých týchto podujatí boli nadmieru spokojní. Vyplýva to najmä z ich monotematickosti spojenej s určitou intímnosťou, v porovnaní

so širokou paletou vlastného CSI. Toto však neznamená, že by som mohol odobrovať platenie cestovného (autobus, lietadlo a pod.) z prostriedkov i tak značne vysokých kongresových poplatkov pre časť účastníkov. Sám som veľkým zástancom monotematických sympózií, avšak nie v rámci CSI. Na príslušnú dlhú dobu trvania CSI a sympózií sa totiž ťažko uvoľniť a preto bolo prof.Robinom navrhnuté, aby budúce CSI netrvali dlhšie než 1 týždeň.

V závere sa chcem opäť vrátiť k obrovskému vedeckému spoločenskému i politickému prínosu XX.CSI nie len pre našu spektroskopiu, ale pre celú našu vlasť. Už tá okolnosť, že sa nám dostalo cti organizovať toto podujatie, ktoré sme napriek pochybovačom dôstojne zvládli, vďaka častokrát nadľudskému úsiliu zainteresovaných organizátorov. Je mi zrejmé, že ako mimopražský pracovník som bol uchránený mnohých stresov a zhonov. Ich úspešné zvládnutie úprimne obdivujem. Sám som sa v rámci uvedených možností plne zapojil ihneď od začiatku za čo možno najlepší priebeh tohto nášho spoločného podujatia a preto nechcem vynašať nejaké hodnotenie ako nezainteresovaná osoba. Napriek tomu sa mi však žiada poďakovať všetkým čo priložili ruku k dielu za ich prácu, čo bola napriek uvedeným úprimne mysleným a vyjadreným pripomienkam korunovaná plným úspechom. Nech nám preto všetkým výsledky tohto kolokvia slúžia ako zadostučinenie.



АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ОТДЕЛЕНИЕ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ
ИНСТИТУТ СПЕКТРОСКОПИИ

142092 п/о Академгородок,
Моск. обл. Подольский р-н

21.09.77 № 1621/517

На № _____

Д-ру И. Куба

Президенту чехословацкого
спектроскопического
общества

Председателю Организационного
комитета XX Международного
коллоквиума по спектроскопии

Национальный технический музей,
Коспельни 42, Прага 7

Глубокоуважаемый доктор Куба

И хочу еще раз от имени советской делегации и от себя лично сердечно поблагодарить Вас и Ваших сотрудников за теплый прием и внимание, оказанное советской делегации на XX Международном коллоквиуме по спектроскопии в ЧССР.

Коллоквиум прошел на высоком научном и организационном уровне, что в значительной мере обусловлено отличной работой организационного комитета.

Мы особенно благодарны докторам И. Рубешке, Е. Плишко, Д. Папоушеку, М. Хораку и В. Мразу за теплый прием и большую помощь, оказанную нам в Праге.

Искренне уважающий Вас
проф. *С. Мандельштам*
Председатель Совета по спектроскопии
АН СССР
руководитель советской делегации

Akademie der Wissenschaften der DDR

Zentralinstitut
für Optik und Spektroskopie (ZOS)
Der Direktor

1199 Berlin-Adlershof, den 14.10.77
Rudower Chaussee 6

Zeichen: Mue,
Bei Antwort anzugeben

Československá spektroskopická
společnost CSAV

Frau Dr. Alena Nová CSc

16000 P r a g 6 - CSSR

Kozlovská 1

Sehr geehrte Frau Dr. Nová!

Ihre Tagung in Prag ist mir sowohl von den Vorträgen wie von der Organisation her in bester Erinnerung.

Danach verbrachte ich noch meinen Urlaub in der Hohen Tatra und konnte so noch andere Teile Ihres schönes Landes kennen lernen.

Ich möchte Ihnen und der Spektroskopischen Gesellschaft noch einmal meinen herzlichen Dank für die Einladung und die Gastfreundschaft sagen und verbleibe mit

vorzüglicher Hochachtung

Prof. Dr. *K. Junge*

Drahtwort
11 25 37
adwad

Fernsprecher
Sammelruf
6 70 28 41
Berlin

Bankkonto Berliner Stadtkontor
Konto-Nr. 6741-11-190

INSTITUT FÜR ANORGANISCHE UND ANALYTISCHE CHEMIE
DER L. EÖTVÖS UNIVERSITÄT
BUDAPEST, VIII., MÚZEUM KRT. 4/B
UNGARN

Budapest, 3, 10, 1977.

Herrn
Direktor Dr. J. Kuba
Národní Technické Museum
Kostelni 42.
PRAHA 7.

Lieber Herr Kollege !

Nach meiner Heimkehr aus der Tschechoslowakei habe ich so viel zu tun gehabt, dass ich erst heute zum Schreiben an Sie hinkommen konnte.

Zuerst möchte ich mich für meine "Johannes Marcus" Medaille nochmals bedanken. Das ist nicht nur eine persönliche Angelegenheit. Es ist ebenfalls eine Anerkennung der Arbeit ungarischer Spektroskopiker. Weiters ist diese Auszeichnung eine Geste von einem Nachbar zu dem Anderen, ein Zeichen der Liebe und Freundschaft. Das schätze ich am höchsten. Das Leben des Eigentümers der Anerkennung ist nämlich sehr begrenzt; nicht aber das Bestehen der Spektroskopie und Spektroskopiker, die uns überleben.

Zum Schluss möchte ich Ihnen und dem ganzen Organisationskomitee zu dem Erfolg des bisher am grössten europäischen Colloquium Spectroscopicum Internationale gratulieren. Ich wünsche Ihnen allen noch weitere schöne Ergebnisse und eine recht gute Gesundheit dazu.

Mit vielen herzlichen Grüßen

Ihr:


Prof. T. Török



COLLOQUIUM SPECTROSCOPICUM INTERNATIONALE XXI
8th INTERNATIONAL CONFERENCE ON ATOMIC SPECTROSCOPY

Secretariat : Post Office Box 109, Cambridge CB1 2HY.

TECHNICAL COMMITTEE

Reply to the : CHAIRMAN

12th September 1977

Dr. G. F. Kirkbright
Imperial College of Science and Technology
Department of Chemistry
South Kensington
London SW7 2AY

Dr I Rubeska
Geological Survey
Prague
Malostranske Amesti 19
Prague 1
Czechoslovakia

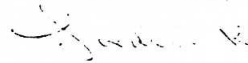
Dear Ivan,

I am writing to congratulate the Organising Committee of the 20th CSI/7th ICAS on the excellence of the organisation of the Prague meeting. Everybody that I spoke to agreed that this was a very fine conference. Naturally, the excellence of organisation also extended to the particular symposium which I attended (No. 3) at Chlum. Please convey my thanks to those concerned for inviting me to participate in the conference.

I hope we will be able to organise the Cambridge Conference in 1979 as efficiently as you have organised the meeting this year. We will look forward to seeing your representatives in Cambridge for the 21st CSI/8th ICAS.

With best wishes,

Yours sincerely,


Dr G.F. Kirkbright
Chairman, Technical Committee.

GAMS

GRUPEMENT POUR L'AVANCEMENT DES METHODES SPECTROSCOPIQUES
ET PHYSICO-CHIMIQUES D'ANALYSE

ASSOCIATION RÉGIE PAR LA LOI DU 1^{er} JUILLET 1901
CCP PARIS 7114 - 41 L SIRET 775 675 713 00017 CODE APE 9321

88, BOULEVARD MALESHERBES
75008 PARIS
TÉL. 292.20.41 +

Professeur J. KUBA
Pionyrů 10,
160 00 Praha 6
- Tchécoslovaquie -

V/REF.

N/REF. 816/77 - GE/pp

Paris, le 27 septembre 1977

Cher Professeur Kuba,

J'ai un peu tardé pour vous remercier une nouvelle fois de l'excellence de votre accueil lors du Colloque de Prague, ainsi que de celle de vos collègues.

Vous avez organisé un congrès couvrant un vaste domaine de la science spectroscopique et de ses applications dans des conditions que j'ai particulièrement appréciées.

Je n'oublie pas que vous devez vous rendre bientôt à Paris pour une réunion de l'UNESCO. Je me permets de vous rappeler que c'est avec le plus grand plaisir que nous vous recevrons au G A M S, 88 Boulevard Malesherbes à Paris-8ème.

Je vous prie d'agréer, Cher Professeur Kuba, l'expression de mes sentiments distingués et les meilleurs.

Le Directeur,

Prof. G. Emschwiller

DEPARTMENT OF CHEMISTRY
FACULTY OF SCIENCE
THE UNIVERSITY OF TOKYO
BUNKYO-KU, TOKYO

September 29, 1977

Dr. I. Rubeska
Programme Committee
Sekretariat CSI a ICAS
Vysoka skola chemick-technologicka
Suchbatarova 1905
Czechoslovakia

Dear Ivan:

Thank you very much for the invitation to the CSI-ICAS Conference in Prague last month.

My wife and myself enjoyed every minute in Prague, including the big reception, the Garden Party and the excursion as well as meeting many friendly people of your country.

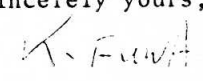
The time was short and we had to leave before the end of the Conference, but it was the most impressive meeting we ever attended.

Please give our best regards and thanks to Drs. Kuba and Pulska.

It was nice meeting your lovely wife and daughter, Atsu and myself will send our warmest regards to them.

Thank you very much again and am looking forward to meeting you in Cambridge and in Tokyo.

Sincerely yours,


Keiichiro Fuwa

KF/hk

Analytická chemie : Lasery umožňují nacházet méně a méně.

(Volný překlad článku A.L.Robinsona, Science, vol.199, 17.3.1978, str. 1191-1193).

Nejmenší počet atomů nebo molekul, který lze zjistit, je jeden. Této meze, která představuje nejvyšší možnou citlivost kterékoliv analytické techniky, dosáhly nyní dvě skupiny výzkumníků, kteří používají laserů k tomu, aby označili vybrané atomy, a ty se pak dají spočítat. Několik dalších skupin, i když nemají tak skvělé výsledky, se rovněž snaží zvýšit citlivost analytických technik, používajících lasery, které se aplikují na široké spektrum atomů a molekul. Blíží se tak doba, kdy tyto metody doplní repertoár analytických nástrojů a zařadí se mezi dobře zavedené metody jako je emisní spektrografie nebo atomová absorpce.

Již dlouho je známo, že laserů lze použít pro krajně citlivou chemickou analýzu. Mezi nejnadějnější způsoby patří fluorescence vzbuzená laserem. Při této technice lze intenzitu fluorescence, vyvolané absorpcí laserového světla, jehož vlnová délka je přesně nastavena tak, aby vyvolala elektronické přechody v atomech nebo molekulách, kvantitativně vztáhnout k počtu absorbujících částic. Malá spektrální šířka, které dosahují dnešní barvivové lasery, zajišťuje jen excitaci částic analyzovaného druhu a vysoká intenzita laserového světla umožňuje, aby se excitovalo dostatek částic a získal se tak měřitelný signál.

O zvlášť úspěšném použití této metody referovali před třemi lety William Fairbank (Colorado State University), Theodor Hänsch a Arthur Schawlow (Stanford University), kteří měřili tensi páry sodíku v rozmezí 9 řádů. Při nejnižší teplotě zjistili autoři sodík v koncentraci 100 atomů v 1 cm^3 ; vzhledem k malému objemu plynu, ve kterém bylo měření prováděno, byla fluorescence ve skutečnosti způsobena přibližně 5 atomy.

Ještě dříve získal zajímavé výsledky Richard Zare se svými kolegy (Columbia University) při studiu fluorescence vzbuzené laserem při chemických reakcích v molekulárních paprscích. Tito pracovníci byli například schopni zaznamenat molekuly BaO ve vybraných vibračních a rotačních stavech při hustotě $5 \cdot 10^4$ molekul v 1 cm^3 a to s použitím pulzního barvivového laseru.

První popis detekce jediného atomu publikovali v březnu 1977 Samuel Hurst, Munir Nayfeh (Yale University) a Jack Young (Oak Ridge National Laboratory). Autoři zaznamenali jediný atom cesia na pozadí 10^{19} atomů Ar a 10^{18} molekul CH_4 v komoře naplněné plynem. Byla to nejvyšší možná citlivost analytických metod; navíc tým z Oak Ridge a někteří další spolupracovníci rozšířili svou techniku na měření fluktuací koncentrace plynu, difuzi atomů v páře a kinetiku chemické reakce. Později tato skupina pozorovala jednotlivé atomy Cs unikající při rozpadu kalifornia. Pracovníci jiných institucí jsou nebo budou schopni sestavit své vlastní přístroje a použít této techniky pro studium tenze par některých prvků při teplotě laboratoře, detekovat neutrina vznikající při jaderných reakcích na Slunci nebo pozorovat jiné vzácné jevy.

Rezonanční ionizační spektroskopie je název, který dali autoři z Oak Ridge procesu, jenž je základem detekce jediného atomu. V zásadě tato detekce kombinuje možnosti pulzního laditelného barvivového laseru selektivně ionizovat žádanou populaci atomů s dobře navrženým proporcionálním počítačem plněným plynem. Tak lze zaznamenat pulsy napětí, jež vzniknou přítomností jediného volného elektronu v počítači.

Detekce jednotlivých atomů laserem

Rezonanční ionizační spektroskopii je možno vidět jako řadu kroků, při kterých je zapotřebí jednoho nebo více fotonů z jednoho nebo více laserových paprsků pro ionizaci jednoho atomu. V nejjednodušším případě je použito dvou fotonů ze stejného laserového paprsku. První foton excituje atom ze základního do vzbuzeného stavu a druhý foton pak ionizuje právě jen vybranou populaci excitovaných atomů. Celý proces se může odehrát uvnitř proporcionálního počítače a právě onen volný elektron, jenž vznikne absorpcí dvou fotonů uvede v činnost proporcionální počítač. Velikost napěťového pulzu v počítači je měřítkem počtu atomů ionizovaných laserovým pulzem. Použití dostatečně výkonného laseru zajišťuje, aby skutečně všechny vybrané atomy byly ionizovány, takže metoda je kvantitativní.

Měřením počtu volných elektronů a nikoliv přímo fluorescence tato technika obchází základní omezení atomové fluorescence vzbuzené laserem, totiž rozptýlené světlo. Rozptýlené světlo není ani absorbováno, ani odraženo, ani neprochází beze změny vzorkem, nýbrž je rozptylováno v různých úhlech vzhledem k laserovému paprsku. Rozptýlené světlo je často mnohem intenzivnější než stálý fluorescenční signál. Jeho vysoká intenzita je důsledkem toho, že prakticky všechno v prostoru, kde je vzorek, může světlo rozptylovat, zatímco jen několik částic vyzařuje fluorescenční záření.

Aby zaznamenali jediný atom Cs, pracovníci z Oak Ridge umístili zdroj cesiových par do prostoru válcovitého, proporcionálního počítače. Postupným oddalováním zdroje od laserového paprsku (který byl rovnoběžný s osou válce) bylo v určitém okamžiku docíleno bodu, kdy pravděpodobnost výskytu jediného atomu Cs v paprsku laseru byla v průběhu pulzu 0,1. Za těchto podmínek platí (jak plyne ze statisticky náhodných dějů), že jestliže je pozorován signál, je způsoben jediným atomem. Měření konaná při různých vzdálenostech zdroje vedla k detekci Cs v koncentracích od 0,1 do 10^8 atomů v 1 cm^3 .

Podle Hursta tuto dvoufotonovou metodu lze uplatnit jen na několik málo alkalických prvků, pokud se používá jen

komerčně dostupných laserů, protože energie dvou fotonů nestačí ionizovat většinu ostatních prvků. Jestliže se použije dvou laserů, metodu lze rozšířit na více než polovinu známých prvků. Jestliže se zapnou oba lasery současně, atom může absorbovat po jednom z fotonů z každého z nich a proto dosáhne mnohem vyšší energetické úrovně. Třetí foton z kteréhokoliv laseru pak dokončí celý proces. Použitelnost tohoto schématu dokázali pracovníci z Oak Ridge na atomech Li a Santos Mayo a Tom Lucatorto (National Bureau of Standards), kteří je aplikovali pro detekci Na.

Druhá technika, vhodná pro zjištění jediného atomu používá fluorescence vzbuzené laserem. Jerry Gelbwachs, Chris Klein a John Wessel (Aerospace Corporation, El Segundo, California) zaznamenali právě jediný atom Na v komoře plněné Ar při 1 atmosféře. Podobné pokusy s niklem a platinou měly méně závratné výsledky (z důvodů, které objasníme níže) s detekčními limity okolo 10^6 atomů v 1 cm^3 .

Pracovníci z Aerospace zdůrazňují, že tři náležitosti jsou kritické pro úspěch techniky, kterou nazvali nasycená optická nerezonanční emisní spektroskopie (saturated optical nonresonant emission spectroscopy - SONRES). První věcí je nerezonanční emise, což prostě znamená, že pozorovaná fluorescence, vzbuzená laserem, má jinou frekvenci než laserové záření. Dosažení nerezonanční emise bylo založeno na výskytu srážek mezi atomy excitovanými laserem do určitého stavu a ostatními atomy nebo molekulami v komoře plněné plynem. Srážky mohou buď přidat nebo odejmout malé množství energie excitovaným atomům, které tak převedou do jiného kvantového stavu. Při přechodu do základního stavu pak tyto atomy emitují fotony - fluorescenční záření, které má o něco vyšší nebo nižší frekvenci než záření laserové. Druhou důležitou věcí je nasycení. K nasycení dojde tehdy, je-li laserové světlo tak intenzivní, že všechny zvolené atomy v daný okamžik buď absorbují nebo emitují záření. Třetí věcí je použití kontinuálního (continuous-wave cw) spíše než pulsního laseru. Nerezonanční emise odstraňuje nebezpečí rozptýleného světla, které nemůže interferovat s fluorescenčním signálem,

protože má jinou vlnovou délku. Nasycení znamená, že každý atom může přispívat k procesu fluorescence několika miliony fotonů za sekundu, čímž je dána vysoká citlivost metody. Použití cw laseru dále zvyšuje citlivost, protože při pulzním režimu laser září jen po malou část celkové doby a tím je celkový fluorescenční signál redukován. Podle Gelbwachse právě použití pulzního laseru způsobilo špatné detekční limity pro platinu a nikl ve srovnání se sodíkem.

Gelbwachs, Klein a Wessel použili při pokusu o detekci jediného atomu techniku počítání fotonů (což je zvláštní režim fotonásobiče se speciální elektronikou, jež reaguje na pulsy indukované jednotlivými fotony). Tito pracovníci v podstatě zopakovali dřívější experimenty stanfordských výzkumníků Fairbanka, Hänsche a Shawlowa s tou důležitou změnou, že sodík se nacházel v komoře plněné argonem a nikoliv ve vakuu. Minimální zjištěná koncentrace Na byla 180 atomů v 1 cm^3 , avšak průměrný počet atomů, jež působily fluorescenci, byl 0,2; to z toho důvodu, že objem plynu, osvětlovaný laserovým paprskem byl mnohem menší než 1 cm^3 . Tento výsledek je základem pro tvrzení, že byl zjištěn jediný atom. Podle odhadu je nejnižší stanovitelná koncentrace 10 atomů v 1 cm^3 .

Srovnání rezonanční ionizační spektroskopie a SONRES je obtížné, zejména proto, že jich bylo použito pro odlišné cíle. Hurst z Oak Ridge zdůrazňuje dynamické možnosti rezonanční ionizační spektroskopie a schopnost analyzovat velké objemy od 1 do 10 cm^3 . Protože se používá pulzního laseru a detektoru, který počítá každý ionizovaný atom bezprostředně po ionizaci, mohou být zkoumány časově závislé jevy jako fluktuace hustoty a další statistické procesy. SONRES, ať již s pulzním nebo s cw laserem, měří průměrnou fluorescenci v daném časovém intervalu a tak je k dispozici pouze informace o stacionárním stavu. Naproti tomu zdůrazňuje Gelbwachs, že pro SONRES se již prokázala možnost adaptace pro plamennou spektroskopii, takže tato metoda může být snadněji aplikována pro stopovou analýzu.

Obtížná volba

Andrzej Miziolek (Scripps Institution of Oceanography) patří k těm, kteří se již museli rozhodnout mezi uvedenými dvěma technikami. Miziolek chce měřit tenzi páry netěkavých prvků při pokojové teplotě. Je to součást projektu, jehož cílem je určit zdroje těžkých kovů, které jsou přítomny v atmosféře. Rozhodnutí padlo ve prospěch rezonanční ionizační spektroskopie, ale vítězství této metody bylo těsné. Rozhodujícím činitelem byl rozsah frekvence komerčně dostupných laditelných barvivových laserů. Současné lasery dovolují stanovit větší množství prvků, které zajímaly Mizioleka, pomocí rezonanční ionizační spektroskopie.

Analytičtí chemici, kteří pracují s komerčními přístroji častěji než se zařízeními, která si sami zbudovali, si uvědomují, že detekce jediného atomu je krajní mezí, dosaženou za optimálních a poněkud umělých podmínek. Rezanční ionizační spektroskopie je například stále ještě tak nová, že její možnosti zdaleka nebyly prozkoumány. Avšak podle aplikací, které již byly provedeny nebo se plánují, lze rozhodně říci, že jde o složitý problém základního výzkumu a nikoliv rutinní techniku stopové analýzy, jakou se převážně zabývají analytičtí chemikové. Nikdo například dosud neukázal, jak uvnitř proporcionálního počítače (nebo jiného detektoru fotonásobičového typu) vypařovat reálné vzorky, jako například mořskou vodu, jež obsahuje mimo ty složky, jež mají být stanoveny, ještě celou řadu dalších. Stejně tak nebylo ukázáno, jak vztáhnout koncentraci v experimentálním objemu plynu ke koncentraci ve vzorku, což je hodnota, která je teprve pro kvantitativní analýzu zajímavá.

Příkladem řešení potíží tohoto typu je úsilí Maya a Lucatorta (NBS), kteří chtějí studovat kontaminaci křemíku sodíkem, což zajímá výrobce mikroelektronických zařízení. Plánují vypařit křemík výkonným infračerveným laserem, avšak obávají se, že kyslík, jenž je vždy v křemíku přítomen, se může sloučit s atomy sodíku dříve, než by mohlo dojít k jejich ionizaci. Kdyby se většina sodíku tímto způsobem odstranila, efektivní citlivost metody by značně poklesla. (Hurst

se svými kolegy již studovali kinetiku reakce mezi cesiem a kyslíkem rezonanční ionizační spektroskopii a došli k závěru, že v tomto případě by reakce s kyslíkem neměla být omezujícím problémem).

James Winefordner a jeho spolupracovníci (University of Florida) jsou průkopníky při aplikaci laserem vyvolané fluorescence za méně exotických podmínek, jako například při plamenové atomové fluorescenční spektroskopii. Ve skutečnosti byly na Floridě v souvislosti s plamenovou spektroskopii prozkoumány snad všechny variace fluorescence vzbuzené laserem, včetně SONRES.

Při prvých experimentech byly detekční limity, získané na Floridě a v jiných laboratořích často horší, než při použití běžných analytických technik, jako je atomová absorpční spektroskopie. Další práce však tuto situaci změnila a poskytuje tak snad nejjasnější představu o možné roli laserové kvantitativní analýzy, kterou by mohla tato metoda hrát v blízké budoucnosti. Stephen Weeks (nyní v NBS), H. Haraguchi a Winefordner na Floridě provedli systematický výzkum atomové fluorescence vzbuzené laserem a aplikované na analýzu jednotlivých prvků; použili pulzního barvivového laseru a řadu vaporizačních metod (plamen, vyhřívání květy atd.) Pečlivou optimalizací použitého zařízení dosáhli detekčních limitů pro 23 prvků na úrovni 1 ng ml^{-1} nebo méně. To znamená proti původním pokusům zlepšení 10 - 200 násobné. I když tyto výsledky nejsou ve všech případech lepší než jakých je možno dosáhnout jinými analytickými technikami, autoři soudí, že další zlepšení je možné a že by se laserem vzbuzená atomová fluorescenční spektroskopie mohla stát nejvhodnější metodou, pokud se vyžaduje extrémní citlivost. Winefordner dodává, že komerční přístroj by se mohl do roka objevit.

V laboratořích Aerospace bylo rovněž použito laserem vzbuzené atomové fluorescenční spektroskopie s použitím techniky SONRES. Při turbulentních podmínkách v plameni a s použitím pulzního barvivového laseru (a nikoliv cw barvivového laseru) nebyli Gelbwachs, Klein a Wessel schopni dosáhnout tak vysoké citlivosti jako za ideálních podmínek čisté komory

plněné argonem, avšak udávaná zjištěná koncentrace (10^5 atomů Na v 1 cm^3 , což odpovídá koncentraci $0,1 \text{ pg ml}^{-1}$) je stále ještě 50 x nižší než je možno určit nejlepší plamenovou metodou.

Určité podobnosti se SONRES má technika vyvinutá v Sandia Laboratories J.P. Hohimerem a P.J. Hargisem, Jr. Tito pracovníci použili pro vypaření roztoků obsahujících Cs nebo Tl grafitové květy. V atomové absorpční spektroskopii přineslo použití takovýchto bezplamenných atomizátorů stonásobné snížení detekčních limitů. Dosažené limity detekce v uvedené laboratoři byly pro Cs 20 pg ml^{-1} a pro Tl $0,5 \text{ pg ml}^{-1}$.

Jiná skupina v NBS pracuje na laserové analytické technice, jež je založena místo na fluorescenci na ionizaci, která odlišuje hledané atomy v kontextu plamenové spektroskopie. Richard Keller, John Travis a jejich spolupracovníci v NBS poprvé pozorovali jev, který nazvali optogalvanickým, totiž absorpci světla plynem ve výbojce s dutou katodou. Později jiná skupina v NBS (Gregory Turk, Travis, James De Voe) aplikovala toto pozorování, později pojmenovaná laserem zvýšená ionizace v plameni, na prvkovou analýzu. Získané detekční limity jsou velmi různé pro několik prvků, jež byly až dosud analyzovány, avšak v nejlepších případech jsou desetinásobně nižší než při použití jiných plamenových technik. Jsou schopni zjistit Na v koncentraci okolo 50 pg ml^{-1} , což odpovídá $5 \cdot 10^6$ atomům Na v 1 cm^3 plamene. Protože je tato metoda stará jen něco více než rok a stěžejí bylo dosaženo optimálních podmínek, Travis soudí, že v budoucnosti bude dosaženo značného zvýšení citlivosti.

Mechanismus pozorovaného jevu je podle uvedených autorů dán názvem techniky, ačkoliv ještě není do podrobnosti pochopen. Experimentátoři pozorují změnu vodivosti plynů plamene, které absorbují laserové záření. Zřejmě laser excituje atomy do vyššího energetického stavu, který lze snadno ionizovat vysokou teplotou plamene.

Aplikace laserem indukované fluorescence se zaměřuje rovněž na kondenzovaný stav, například na roztoky, bez předchozího vypaření. Takové experimenty mohou být zajímavé pro zjiš-

tění určitého typu sloučeniny ve vzorku. V takovém případě mnoho nepomůže prvková analýza. Vzhledem k množství vibračních a rotačních stavů molekuly je prakticky každá fluorescence nerezonanční i bez srážkových efektů. Kondenzovaný stav ovšem představuje zvláštní problém a příslušní pracovníci zdůrazňují, že ve srovnání s analýzou roztoků je zjišťování stopových příměsí v plynech jednoduché. U roztoků například fluorescence způsobena jinými typy molekul může interferovat s fluorescencí hledanou. Detekční limity pro techniky pracující s kondenzovaným stavem jsou obecně horší než pro plynnou fázi.

Měření kontaminace aflatoxiny

Právě včas přišli s aplikací laserem indukované fluorescence Gerald Diebold, Noga Karny a Zare (Stanford) ve spolupráci s Larry Seitzem (U.S. Grain Marketing Research Center, Manhattan, Kansas). Tito autoři se pokouší zjistit stupeň kontaminace kukuřice aflatoxiny, což jsou metabolity s karcinogenními účinky. Kombinací chromatografie na tenké vrstvě, vysokotlaké kapalinové chromatografie a laserem indukované fluorescence byli schopni zjistit určitý aflatoxin v koncentraci 100 ppt (part per trillion, 10^{-9}) váhových. Při dřívějších pokusech prováděných na Kolumbijské universitě, Diebold a Zare oznámili dosažení detekčního limitu 0,75 pg při práci se standardy. Počet aflatoxinových molekul ve zkoumaném objemu 4/ul byl odhadnut na méně než 10^7 .

Podstata techniky vyvinuté na Stanfordu je záměna konvenčních detektorů pro kapalinovou chromatografii detektory využívajícími laserově indukované fluorescence. K dosažení tohoto cíle bylo nutno přivést slabě fluorescenční aflatoxinové molekuly na vhodnější formu pomocí HCl. Pro průchod kolonou kapalinové chromatografie potřebují aflatoxinové molekuly charakteristický čas a jsou při chromatografickém procesu "sraženy dohromady". Autoři použili cw ultrafialového laseru k ozáření tekutých kapiček kontinuálně odkapávajících z konce chromatografické kolony. Avšak charakteristická fluorescence byla zjištěna jen tehdy, odpovídá-li čas průchodu kolonou hodnotě charakteristické pro aflatoxiny.

Podle Zareho došlo při analýze vzorků kukuřice k rušivému vlivu dalších příměsí, takže nebylo dosaženo detekčního limitu zjištěného pro standardní vzorky. Nicméně byl limit snížen asi padesátkrát ve srovnání se staršími metodami. Zare hodnotí budoucí možnosti této metody velmi optimisticky. Soudí, že kombinace vhodné chemické přeměny hledané molekuly na fluorescenční formu s laserově indukovanou fluorescencí může nahradit jiné standardní analytické metody, jako je například radioimunologické hodnocení.

Analytičtí chemikové zdůrazňují, že každá nová technika musí projít několikaletou přechodnou dobou, jež uplyne mezi prvními skvělými výsledky a objevením se ve formě komerčního přístroje. Během tohoto vývojového období musí být optimalizovány pracovní podmínky z různých hledisek, provozní uspořádání, cena přístroje a další parametry. Většina technik používajících laseru jsou teprve v počátečních stadiích tohoto vývoje. Vážnou překážkou případného širokého využití může být cena. Současná cena zařízení s pulzním laditelným barvivovým laserem je okolo US \$ 30 000, což je dvojnásobek automatického atomového absorpčního spektrometru. Druhou překážkou je omezený rozsah frekvence u dostupných laditelných barvivových laserů. Tato zařízení emitují záření hlavně ve viditelné oblasti (i když nyní jsou už i některé pulzní barvivové lasery pro ultrafialovou oblast), avšak energetické hladiny mnoha atomů a molekul odpovídají oblasti ultrafialové. Barvivové lasery mají další nevýhodu v tom, že se s nimi obtížně pracuje ve srovnání s jinými přístroji.

Pozorovatelé se shodují v tom, že cena a složitost laserů omezí na nějaký čas jejich použití pro rutinní kvantitativní analýzu. Protože však existuje trvalý tlak na neustálé zlepšování detekčních limitů, doba technik založených na použití laseru ještě přijde.

Vydává Československá spektroskopická společnost při ČSAV
se sídlem ve Výzkumném ústavu ČKD v Praze 9, Na Harfě 7 .

Za ČSSS zodpovídá Dr.B.Moldan, CSc.

Redakce P.Vampolová. Redakční uzávěrka prosinec 1977

Pouze pro vnitřní potřebu.