



Československá spektroskopická společnost

Bulletin

36

1981

Čs. spektroskopická spol.
pří ČSAV
KNIHOVNA
Příst. č. 164

Dne 10.prosince 1981 se konala v Národním technickém muzeu 32.schůze hlavního výboru Čs.spektroskopické společnosti.
Schůzi zahájil a řídil prof.E.Plško, DrSc.

Z programu:

Dr.Rubeška podal zprávu o činnosti předsednictva. Přednesl návrh předsednictva na omezení počtu schůzí hlavního výboru a valného shromáždění. Hlavní výbor usnesl, že schůze hlavního výboru se budou konat 2x ročně a schůze valného shromáždění 2x za volební období /3 roky/. Doporučuje se spojit schůze hlavního výboru se schůzemi sekcí.

ČSAV schválila pořádání 4.čs.konference o atomové absorpční spektroskopii se zahraniční účastí.

Na základě zprávy Ing.Šlára o činnosti komisí schválil hlavní výbor návrh předsednictva a pověřil Ing.I.Obrusníka vedením komise referenčních materiálů
Ing.K.Volku vedením přístrojové komise.

Dne 10.prosince 1981 se konalo v Národním technickém muzeu valné shromáždění Čs.spektroskopické společnosti s tímto programem:

1. Zahájení
2. Přednáška
Dr.Milan Horák: Chemické reakce stimulované infračervenými lasery
3. Předání plakety Jana Marca Marci
4. Plán odborné činnosti na rok 1982
5. Zpráva o hospodaření
6. Různé

Iniciace chemických reakcí infračervenými lasery

Milan Horák, Ústav fyzikální chemie a elektrochemie J. Heyrovského ČSAV, Praha

K iniciacím chemických reakcí lze použít laserových zdrojů záření. Lasery emitující viditelné resp. ultrafialové záření vyvolávají reakce prostřednictvím excitovaných elektronových stavů. Při excitacích infračervenými lasery /např. CO₂ laserem emitujícím v oblasti kolem 1000 cm⁻¹/ dochází k iniciacím molekul v jejich základním elektronovém stavu v důsledku čerpání do vyšších stavů vibračních.

Čerpání infračervenými lasery může probíhat rozličným způsobem. Pulzní lasery s vysokou výstupní hustotou fotonů mohou vyvolat multifotonovou absorpci, po níž následuje - ještě před srážkou s jinou molekulou - rychlá disociace. Tento mechanismus je spojen s vysokou selektivitou procesu vedoucímu až k možné separaci izotopů. Čerpání kontinuálními lasery s menší výstupní hustotou fotonů probíhá přes jednofotonovou absorpci; kumulaci vibrační energie, potřebnou k dosažení disociačního limitu, obstará kolizní výměna mezi excitovanými molekulami.

Čerpání může být prováděno také prostřednictvím molekul tzv. "sensibilizátorů", t.j. silných absorbérů infračerveného záření, z nichž se energie potřebná k vyvolání reakce přenáší na molekuly reaktantu kolizemi. Ukázkou takové reakce je rozklad molekuly CH₃I sensibilizovaným SF₆. V prvním chemickém kroku vzniká z molekuly CH₃I methylový radikál, který podle podmínek experimentu poskytuje /abstrakční reakcí/ methan případně /po rekombinaci/ ethan. Reakce mezi BCl₃ /absorbér záření/ a hexafluorbenzenem probíhá jinak: molekuly navzájem vymění halogeny a v prvním chemickém kroku se vytvoří BFCl₂ a C₆F₅Cl. Obě reakce mají prahový charakter /při určitém výkonu laseru - podprahovém - již neproběhnou/ a jejich rychlost a průběh lze významně ovlivnit podmínkami experimentu.

Zatímco "chemismus" reakcí lze poměrně bezpečně sledovat, není tak jednoduchý výklad mechanismu přenosu energie v reakčním systému. Komplikace vyplývají i z poměrně silného proudění, k němuž v reaktoru dochází v důsledku lokálního ohřátí plynů.

Jak ukazuje zkušenost z prvního desetiletí laserové chemie, je možno očekávat další úspěšný vývoj především při separaci izotopů a v chemii jednoduchých molekul. S ohledem na možnost obměňovat parametry experimentu v širokých mezích může tato metoda nalézt významné uplatnění při studiu mechanismů reakcí v plynném stavu, přenosu energie mezi molekulami a hledání specifických reakčních kanálů.

SEKCE OPTICKÉ ATOMOVÉ SPEKTROSKOPIE

Odborná skupina automatické spektrometrie v hutnictví

Ve dnech 15.-19.9.1981 se konal v Ostravě v hotelu Atom 8. kurz automatické spektrometrie pro začátečníky, pořádaný ve spolupráci s Dozem techniky v Ostravě. Na programu byly přednášky a praktická cvičení ve Vítkovických železárnách, NHKG a Třineckých železárnách. Odborným garantem byl Ing. Karel Kuboň, CSc

Odborná skupina atomové absorpční a plamenové spektroskopie

7. pracovní seminář o využití AAS ve výzkumu a výrobě byl pořádán ve dnech 19.-24.10.1981 v rekreačním středisku Sasanka v Tatranské Lomnici.

Program byl věnován zejména základním teoretickým a praktickým problémům atomizace v elektrotermických atomizátorech, postavení ICP spektrometrie v rámci spektroskopických metod a analytickým aplikacím.

Poprvé v rámci semináře byla uvedena část přednášek ve formě "posterů"; tento způsob prezentování přednášek se setkal s velkým zájmem a ohlasy členů skupiny. Bylo rozhodnuto, že při dalších akcích bude aplikován v daleko širším rozsahu.

Souhrny přednesených přednášek jsou zveřejněny ve sborníku semináře.

Byly předneseny přednášky:

Ivan R u b e š k a , Ústřední ústav geologický, Praha: Současný stav znalostí o procesech v ETA.

Ivan N o v o t n ý , katedra analytické chemie PF UJEP, Brno: Měření aktivační energie v ETA a jejich interpretace.

Josef Musil, Ústřední ústav geologický, Praha: Matematický model tvaru signálu v AAS s ETA zahrnující interakci volných atomů se stěnou.

Jiřina Korečková, Ústřední ústav geologický, Praha: Faktory ovlivňující stanovení As pomocí grafitové květy.

Josef Komárek, Lumír Sommer, katedra analytické chemie PF UJEP, Brno: Vliv organických činidel při elektrotermické atomizace prvků.

Václav Sychra, Dana Kolihová, Robert Hlaváč, Karel Kult, VŠCHT Praha, Jiří Doležal, SLS VŠCHT a ČSAV, Praha, Petr Püschel, Zdeněk Formánek, VÚHU Most: Stanovení vzácných zemin ve wolframovém elektrotermickém atomizátoru.

Zdeněk Formánek, Petr Püschel, VÚHU Most, Jiří Doležal, SLS VŠCHT a ČSAV Praha, Robert Hlaváč, VŠCHT Praha: Wolframový elektrotermický atomizátor WETA 80.

Eduard Plško, Vladimír Streško, Jana Kubová, Geologický ústav UK, Bratislava: Problematika nerezonanční absorpcie žiarenia v elektrickom oblúku.

Vladimír Streško, Eduard Plško, Jana Kubová, Geologický ústav UK, Bratislava: Sledovanie spektier primárných zdrojov používaných v AAS.

Jiří Dědina, Ústav nukleární biologie a radiochemie ČSAV, Praha: Interference při atomizaci hydridů.

Radmila Ajlec, Janes Štupar, Institute "Jožef Stefan", E.Kardelj University, Ljubljana, Jugoslavia: Nebulization and Atomization of Suspensions in Flames.

Jiří Doležal, SLS ČSAV a VŠCHT, Praha, Miloš Hejtmánek, VŠCHT Praha: Zlepšení reprodukovatelnosti stanovení síranů metodou MECA.

Ivan Janoušek, Ústřední výzkumný ústav k.p. Škoda Plzeň: Stanovení skandia plamenovou emisní spektrometrií po extrakčním zkoncentrování.

Mikuláš Matherny, katedra chemie HF VŠT, Košice, Eva Reitznerová, Vedecko-výzkumné pracoviště kovových materiálů VŠT, Košice: Porovnanie informačnej obsažnosti, efektivity a rentability AAS, OES a FSX metod.

Jiří Toman, Geologický průzkum Ostrava, závod Brno: Analýza přírodních vod pomocí ICP-OES.

Eduard Plško, Geologický ústav UK, Bratislava: AAS a ICP.

Josef Musil, Ivan Rubeška, Ústřední ústav geologický, Praha: Stanovení arzenu v kosterním materiálu metodou AAS s generovaným AsH₃.

Milan Fara, Výzkumný ústav energetický, Praha: Způsob provedení statické sorpce na chelatačním ionexu spheron-oxin při analýze velmi čistých vod.

Irena Tesařová, Stanislav Roskovec, Český hydrometeorologický ústav, Praha: Stanovení některých těžkých kovů v atmosferickém aerosolu.

Zdeněk Formánek, Petr Püschel, VÚHU Most, Jiří Doležal, SLS VŠCHT a ČSAV, Robert Hlaváč, Dana Kolihová, Václav Sychra, VŠCHT, Praha: Wolframový elektrotermický atomizátor "WETA 80".

Anna Šefflová, KHS Brno, Josef Komárek, katedra anal. chemie PF UJEP Brno, Jaromír Sponar, KHS Brno: Stanovení arsenu ve vzorcích z ochrany životního prostředí.

Blanka Maňkovská, I. Chudík, VÚLH Zvolen, O. Chudíková, Správa TANAPU T.Lomnica: Olovo, kadmium a zinek v TANAPE.

Petr Püschel, Zdeněk Formánek, VÚHU Most: Stanovení některých toxických elementů v zemědělských plodinách.

S. Zima, O. Čelechovská, J. Korytářová, Katedra chemie, fyziky a biochemie Vysoké školy veterinární, Brno: K problematice sledování stopových prvků v potravinách a surovinách živočišného původu s pomocí AAS.

M. Lacková, O. Palušová, Výzkumný ústav preventivního lékařství, Bratislava: Stanovenie ortuti v biologických materiáloch prístrojom MAS-50A.

Hana Dočekalová, Výzkumný ústav veterinárního lékařství, Brno, Jiří Dědina, Ústav nukleární biologie a radiochemie ČSAV, Praha: Příspěvek ke studiu atomizace hydridu ve vyhřívané křemenné kytě.

Natálie Pliešovská, Eva Krakovská, Katedra chemie Hutníckej fakulty VŠT, Košice, Eva Reitznerová, Výzkumné pracoviště kovových materiálů VŠT, Košice: Stanovenie Hg metódou AAS v súvislosti s kontrolou chemickej kvality životného prostredia.

Ladislav Koller, Katedra chemie Hutníckej fakulty VŠT, Košice: Využitie prístroja AAS-1 v emisnom režime pri kontrole chemickej kvality životného prostredia.

Ivo Lang, Ústav geologie a geotechniky ČSAV, Praha, G. Šebor, Václav Sychra, VŠCHT, Praha: Analýza ropy a ropných produktů metodami atomové spektrometrie.

Robert Hlaváč, Naďa Hlaváčová, Jiřina Olivová, Václav Sychra, VŠCHT Praha: Stanovení fosforu v koncentrátech aditiv do mazacích olejů plamenovou AAS.

Jiřina Olivová, Robert Hlaváč, Dana Kolihová, VŠCHT Praha: Stanovení síry v organických látkách molekulovou absorpční spektrometrií po generaci sulfanu nebo oxidu siřičitého.

D. Oktávec, O. Rohoň, J. Remeň, R. Pátek, Slovnaft n.p., Bratislava: Stanovenie kovov v koncentrátoch olejových aditívov metódami AAS.

Jarmila Kožušníková, Výzkumný ústav hutnictví železa, Dobruška: Využití AAS ke stanovení Sn v ocelích a vybraných feroslutinách.

Eva Reitznerová, Vedeckovýskumné pracoviisko kovových materiálů VŠT, Košice: Hodnotiace parametre rozboru mediarenských trosiek a kamienkov AAS metódou.

J. Mareček, I. Vachtová, J. Sobotka, Chemo-petrol k.ú.o., Výzkumný ústav anorganické chemie, Ústí nad Labem: Zkušenosti s přístrojem VARIAN 775 ABQ - aplikace na kontrolu surovin a chemických výrobků.

Petr Magliá, Jaroslava Newiaková, Metalis, Nejdk u Karlových Varů: Zkušenosti s využitím metody AAS při výrobě a provozní kontrole Al-slitin v tlakové slévárně.

Bohumil Žitňanský, Ústav metrologického výzkumu ČSMÚ, Bratislava: Niektoré poznatky z overovania grafitových atomizátorov vyrábaných v n.p. Elektrokarbon Topolčany.

Eliáš Feriančík, Luboslav Blahut, Ivan Hric, Geologický prieskum n.p., Spišská Nová Ves: Stanovenie olova za prítomnosti väčšieho množstva pyrita metódou AAS a OES-ICP.

Marcella Šucmanová, Vysoká škola veterinární, Brno: Stanovení některých stopových prvků v odpadních vodárenských kalech.

Ondrej Rohoň, Slovnaft n.p., Bratislava: Stanovenie odoerových kovov v opotrebovaných motorových olejoch: vplyv matrix efektov na druhu použitého organokovového štandardu.

SEKCE MOLEKULOVÉ SPEKTROSKOPIE

Odborná skupina spektroskopie pevného stavu

17.pracovní schůze se konala 23.listopadu 1981 ve Fyzikálním ústavu ČSAV v Praze. Schůzi připravila a řídila Dr. Milena Závětová, CSC.

Byla přednesena přednáška:

Jiří Mareš, Fyzikální ústav ČSAV, Praha: Laditelné lasery pro blízkou ič oblast.

Na semináři byly shrnuty poznatky o vývoji a současném stavu laditelných laserů pro blízkou infračervenou oblast. Dvacetiletý vývoj laserů a laserových systémů se projevil i v této spektrální oblasti, kde lze nyní používat různé neladitelné a laditelné lasery, např. pro řadu kvalitativně nových typů měření v laserové spektroskopii. Parametry ič laserů umožňují i další aplikace ve strojírenství, lékařství a monitorování životního prostředí.

Z neladitelných ič laserů se nejvíce používají lasery na bázi Nd³⁺ iontů v pevné fázi s čarou 1064 nm jak v pulsním tak i kontinuálním provozu. Ve spektroskopii je YAG:Nd³⁺ laser a jeho harmonické /2. - 532 nm, 3. - 355 nm a 4. - 266 nm/ čerpacím zdrojem laditelného barvivového laseru, který pracuje ve spektrálním oboru 350 - 2000 nm.

Ke generaci laditelného ič záření se používají také stimulované a nelineární optické jevy, zejména stimulovaný Ramanův rozptyl na plynech /H₂, D₂ a N₂/ a parametrická generace a směšování. Stimulovaný Ramanův rozptyl záření laditelného barvivového laseru umožňuje generovat záření v oboru 200 - 20000 nm. Parametrická generace a směšování /generace součtové a rozdílové frekvence dvou laserů/ na nelineárních optických krystalech např. typu LiNbO₃, KDP aj. může být zdrojem laditelného laserového záření v oboru 200 - 5000 nm.

Současný stav laditelných ič laserů kvalitativně i kvantitativně předčí klasické zdroje záření a monochromátory používané při spektroskopických měřeních.

Odborná skupina magnetické rezonanční spektroskopie

Ve dnech 31.8.-4.9.1981 uspořádala brněnská pobočka Čs.společnosti chemické ve spolupráci s odbornou skupinou magnetické rezonanční spektroskopie ČSSS a pobočkou ČSVTS n.p. Lachema Brno kurz magnetické rezonanční spektroskopie pro pokročilé nazvaný Letní škola NMR spektroskopie II.

Účastníci kurzu, u nichž byly předpokládány základní znalosti NMR, byli formou přednášek a cvičení u spektrometru a počítače v n.p. Lachema a v Ústavu přístrojové techniky ČSAV seznámeni s problematikou dynamické NMR spektroskopie, simulace dat a využití malého počítače v NMR.

Garantem kurzu byl Dr.Miroslav Holík, CSc.

Odborná skupina elektronové spektroskopie a fotochemie

10. pracovní schůze se konala dne 15.prosince 1981 na VŠCHT v Pardubicích.

Schůzi připravil a řídil Ing.Miloš Nepraš, CSc

Byly předneseny přednášky:

Miloš T i t z , Výzkumný ústav organických syntéz, Pardubice: Metoda konfigurační analýzy vlnových funkcí elektronových stavů jako analytická metoda v rámci modelu "molekul v molekule".

U cyklických i "lineárních" polyenů dochází k výrazné alternaci délek vazeb, takže lze vazby v těchto molekulách považovat za lokalizované. Naopak kondenzované aromatické molekuly představují opačný příklad molekul s nevýraznou alternací vazeb; avšak i v této třídě molekul /aromatických/ lze nalézt řadu molekul, v nichž polyenické jednoduché vazby dělí konjugovaný systém na několik podsystémů /fragmentů/ - příkladem může být perikondenzovaná molekula peryleny, kterou tyto polyenické jednoduché vazby dělí na dva naftaleny. Znamená to tedy, že polyenická jednoduchá vazba natolik přerušuje konjugaci, že z hlediska π -elektronové aproximace lze v místě takovéto vazby provést dělení /fragmentaci/ molekuly na jednotlivé podsystémy.

Toto fyzikálně-chemické zdůvodnění možnosti fragmentace konjugovaných molekul na podsystémy tvoří základnu pro nový kvantově-chemický přístup k výpočtu vlastností molekul /včetně elektronového spektra/; tento přístup lze označit za model "molekul v molekule" se zkratkou MIM /Molecules-In-Molecule/. V r.1955 navrhli Longuet-Higgins a Murrell metodu [1] /LHM metoda/, která spojovala dílčí úspěchy, jichž bylo dosaženo při studiu elektronové struktury obřích molekul /supermolekul/, CT-komplexů /CT - charge transfer; přenos náboje/ a elementárních excitací v molekulových krystalech /Davydovových molekulární exciton/. V LHM metodě je každý z elektronových stavů celkového systému dán jako lineární kombinace lokálně excitovaných stavů na podsystémech a CT excitovaných konfigurací mezi podsystémy. Obecným problémem MIM modelu je fragmentace na podsystémy, neboť ne vždy je fragmentace zřejmá či jednoznačná. Tato obtíž je v rámci MIM modelu překonána v metodě konfigurační analýzy [2] /CA - Configuration Analysis/, kde je fragmentace podrobena kvantitativnímu kritériu

vhodnosti. I když metody CA a LHM mají rozdílná východiska - jsou to protipóly v rámci MIM modelu - obě se výhodně doplňují [3] /o CA metodě se dá říci, že je v rámci MIM modelu metodou analytickou, zatímco metoda LHM je metodou syntetickou/.

- [1] Longuet-Higgins, H.C., Murrell, J.N.: Proc.Phys.Soc., A 68, 601 /1955/.
- [2] Baba, H., Suzuki, S., Takemura, T.: J.Chem.Phys., 50, 2078 /1969/.
- [3] Fabian, J.: Signal AM 6, 307 /1978/ /jako I/; 7, 67 /1979/ /jako II/.

viz také:

- Nepraš, M., Fabian, J., Titz, M.: Collect.Czech.Chem.Comm., 46, 20 /1981/-
- Nepraš, M., Titz, M.: Int.J.Quant.Chem., XVI, 543 /1979/.
- Fabian, J., Melhorn, A., Fratev, F.: Int.J.Quant.Chem., XVII, 235 /1980/.

V. Ř e h á k , VŠCHT, Pardubice: Fotochemie v micelárních systémech.

V referátu byl vymezen pojem micelárních roztoků, charakterisovány iontové a neiontové micelární systémy a diskutováno ovlivnění některých fyzikálně-chemických vlastností roztoků v oblasti kritické micelární koncentrace.

V závislosti na způsobu solvatace v micely a na její iontové povaze jsou ovlivňovány spektrální, fotofyzikální a fotochemické vlastnosti rozpuštěných molekul. Pozornost byla orientována na organické molekuly, změny v jejich absorpčních a luminescenčních spektrech, ovlivnění agregačních rovnováh, snížení ionizačního potenciálu, možnostem přenosu elektronu po fotoexcitaci donoru nebo akceptoru. Byly uvedeny příklady systémů sledovaných na fotochemickém pracovišti VŠCHT.

Pozn.red.: Micela je koloidní částice ze dvou vrstev opačně nabitých iontů.

SEKCE SPECIÁLNÍCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD

Ve dnech 21.9.-23.9.1981 se v Praze konal seminář o energeticky dispersní analýze, který pořádala sekce speciálních spektroskopických metod ve spolupráci s organizací FMTIR Služba výzkumu a firmou Edax /Europe/ B.V.

V rámci pořádání semináře byla též uskutečněna akce Round Robin, která dala čs. uživatelům poprvé možnost vyzkoušet si na neznámém vzorku, dodaném firmou Edax všem zájemcům, svou analytickou dovednost. Z přihlášených sedmácti pracovišť, které obdržely vzorek neznámé oceli /vzorek NBC-132, molybden-wolfram-chrom-vanadová ocel/ bylo hodnoceno 8 výsledků, které došly k posouzení do Holandska do 1.9.t.r.. Komise odborníků vedená Dr. Van Assem vyhodnotila jako nejlepší analytickou práci Ing. Z. Kotrby z ÚÚG, který obdržel stříbrný tulipán ve skutečné velikosti. Druhou nejlepší analytickou práci odvedla Ing. A. Langrová z Ústavu geologie a geotechniky ČSAV v Praze.

Seminář připravil Ing. Václav Hulínský, CSC

Byly předneseny přednášky:

Van A s s e , Edax: Základní principy mikroanalýzy, automatizace energeticky disperzní analýzy a analýza velmi lehkých prvků pomocí jednotky Econ.

M. G r i c o v á , J. V á l e k , Elektrotechnická fakulta ČVUT, Praha: Zkušenosti s bezokénkovým analyzátozem EDAX-9100/60.

Karel J u r e k , Ústav anorganické chemie ČSAV, Řež: Některé problémy se stanovením nízkých koncentrací systémem Edax.

B. L e n c o v á , Ústav přístrojové techniky ČSAV, Brno: Některé zajímavé aplikace REM Tesla BS 350 a analyzátozem Edax v biologii.

Ultravakuový autoemisní rastrovací elektronový mikroskop BS 350 byl vyvinut v ÚPT ČSAV a dokončen v r.1976, kdy byl vystavován na veletrzích Incheba a MSV Brno. Zde byl také zakoupen detektor rtg záře-

ni, analyzační jednotka 711 a počítač NOVA 2 od firmy EDAX. Detekční jednotka je umístěna na ultravakuové přírubě a umožňuje dosažení meziho vakua $2-3 \times 10^{-9}$ torr v komoře preparátu. V tomto vakuu nedochází k pozorovatelné kontaminaci preparátu. Jistou nevýhodou autoemisní trysky orientace /310/ je malá dlouhodobá stabilita proudu ve stopě, nutná pro kvantitativní analýzu se standardy.

Za dobu provozu mikroskopu a analyzátozem jsme provedli řadu analýz při řešení různých technologických problémů, zejména v metalurgii, polovodičové technice apod. Několikrát jsme byli požádáni o provedení analýz biologických objektů, jako ovčí vlna, vlasy apod. O dvou aplikacích bylo referováno podrobněji:

1/ Charakteristika a identifikace kontaminujících částic na ultratenkých řezech biologických preparátů pro BFÚ ČSAV Brno /viz Reichmanová V. aj., abstrakty XVII.čs.konf.elektronové mikroskopie, Košice 1981/.

2/ Analýza cévních stěn krys trpících hypertenzí a arteriosklerózou - ve spolupráci s AdW NDR. Zvýšený obsah křemíku a chlóru ve stěnách cév bývá přisuzován přípravě vzorku. Ukazuje se však, že tyto prvky se nevyskytují ve tkáních zdravých jedinců /viz C.H.Becker a A.G.S. Jánossy, EDAX EDITOR 9, č.3 /1979/, 1/.

Antonín R e k , Karel S t r á n s k ý , VÚ 070, Brno, Jiří Š v e j c a r , Strojní fakulta VUT, Brno: Porovnání meze detekovatelnosti pro WDA /JXA-3A, JSM-U3/ a EDA /JEM-100C/EDAX/.

Meze detekovatelnosti prvků v železe v rozsahu celého periodického systému byly změřeny pro bodovou analýzu na dvou mikroanalyzátozem vlnově dispersního typu /JXA-3A a JSM-U3/ a jednom mikroanalyzátozem vlnově dispersního typu /JEM-100C/EDAX/.

Vzájemné porovnání limitních možností tří uvedených typů mikroanalyzátozem umožňuje tab.I. Uvedené hodnoty se vztahují k době měření 100 s a jsou uvedeny v ppm /1 ppm = $10^{-4}\%$ /.

Výsledky měření mezi detekovatelnosti prvků pro bodovou analýzu masivních vzorků na dvou mikroanalyzátozem vlnově dispersního typu /JXA-3A a JSM-U3/ a jednom mikroanalyzátozem energiově dispersního typu /JEM-100C/EDAX/ ukazují, že průběh mezi detekovatelnosti prvků v závislosti na atomovém čísle má u obou metod stejný charakter, přičemž úroveň mezi detekovatelnosti energiově dispersní analýzy je asi o 1 až 1,5 řádu horší než u vlnově dispersní analýzy, přičemž vliv atomového čísla matrice je u obou metod přibližně stejný. [1].

Literatura:

[1] Stránský K., Rek A., Švejcar J.: In: Studium chemického složení v mikroobjemech, Čs.společnost pro nauku o kovech při ČSAV, Praha-květen 1979, s.29.

Rádi bychom upozornili zejména na třetí z uvedených jevů - kontaminaci - kterému zatím prakticky nebyla věnována pozornost. U masivních vzorků lze vliv kontaminace zanedbat, ovšem u ultratenkých vzorků může kontaminace analyzovaného místa výrazně zkreslit výsledek analýzy. Bez použití antikontamináčného zařízení průměr kontaminované oblasti rychle narůstá a při delších dobách analýz /3 až 5 min/ jsme naměřili hodnotu 100 a 300 nm!

Měření absolutní meze detekovatelnosti ukázalo [5], že hodnoty těchto mezi jsou pro EDS i VDS systémy srovnatelné a o cca 1 až 2 řády nižší, než bývá uváděno ve firemní literatuře.

Podle našich dosavadních zkušeností je minimální rozměr částice, kterou lze ještě na tenké kovové folii analyzovat v optimálním případě roven cca 100 nm. Částice extrahované na replice mohou mít rozměr podstatně menší, 30 až 50 nm. Za určitých předpokladů lze analyzovat i částice mnohem menší, cca 10 nm [6].

Literatura:

- [1]. Švejcar J., Dorazil E.: Knižnice VÚT, A 18 str.127, 1978
- [2]. Dorazil E., Švejcar J.: Mém.Sci.Revue de Métall., 5, str.261, 1981
- [3]. Švejcar J., Dorazil E.: Sborník "Mikrosonda Tagung /5/" Lipsko, str.59, 1981
- [4]. Stránský K. et al.: Sborník "Studium chemického složení v mikroobjemech" Praha, str. 29, 1979
- [5]. Rek A. et al.: Sborník "IV.metalograf.sympos." Vys.Tatry, str. 59 /část I./, 1980
- [6]. Švejcar J. et al.: Journal of Magnetism and Magnet.Mater. 19, str.45, 1980

Zdeněk K o t r b a, Ústřední ústav geologický, Praha: Příspěvek k analýzám na energiově dispersních systémech.

V Bulletinu č.28 z roku 1978 byl uveřejněn článek "Kontrolní a srovnávací analýzy čs.vzorků na energiově dispersních analyzátořech". Autor /Ing. František Štorek/ uvedl výsledky analýz velmi prospěšné a poučné akce, kterou zorganizoval. Zadal vybrané vzorky o známém složení k analýze různým firmám, vyrábějícím energiově dispersní systémy a porovnal obdržené výsledky. Když jsme analyzovali v laboratoři rentgenové mikroanalýzy v Ústředním ústavu geologickém jeden ze vzorků označený jako "nástrojová ocel", získali jsme odlišné výsledky od deklarovaného složení.

Analýza vzorku nástrojové oceli byla provedena rentgenovým mikroanalyzátořem SEMQ - řízeném počítačem PDP 11. Použité standardy byly jednotlivé prvky. Korekce výsledků byly provedeny "on line" použitím korekčních koeficientů, jejichž původce je Toyota Central Research and Development Laboratory - a dále metodou ZAF, odvozenou od Springera /program vypracován ing.R.Rybkou/. Pro zpřesnění výsledků byla použita metoda "vloženého standardu" /NBS č.132/.

Protože EDS jsou neustále v popředí zájmu, uvádím pro objektivní posouzení výsledků EDS naší analýzy a ze zmíněné publikace deklarovanou analýzu /jako správnou/ a analýzy EDS nástrojové oceli.

	Deklarované složení	EDAX	LINK	ORTEC	TRACOR	SEMQ ÚÚG
V	1,72	-	1,78	1,81	1,50	1,70
Cr	6,28	5,6	5,22	4,94	5,20	5,36
Mn	0,60	-	0,48	0,42	0,50	0,60

	Deklarované složení	EDAX	LINK	ORTEC	TRACOR	SEMQ ÚÚG
Fe	72,80	74,0	69,05	71,13	71,10	70,20
Ni	-	-	-	-	-	0,02
Cu	0,10	-	-	-	-	0,14
W	10,68	12,1	13,73	13,58	14,20	13,32
Si	0,40	-	-	0,30	-	0,08
Mo	1,21	1,40	1,47	1,80	1,80	1,47
Co	5,09	4,60	6,18	6,00	5,60	6,32

Porovnáme-li navzájem uvedené hodnoty, zjišťujeme, že všechny EDS poskytují velmi slušné výsledky, ke kterým přistupuje snadná obsluha EDS. Shoda mezi analýzami EDS a SEMQ je větší než s deklarovanou analýzou. Zde je nutno si uvědomit, že výběr standardů pro lokální analýzu je obtížný a projevuje se rozdíl mezi makro a mikroanalýzou stejného standardu. Při dosažení dobré úrovně rentgenové mikroanalýzy a za použití vložených standardů při analýze "on line" bude někdy vhodné analýzy standardů provádět přímo na rentgenových mikroanalyzátořech.

Odborná skupina rentgenospektrální analýzy

Ve dnech 26.-30.10.1981 se uskutečnil v Trojanovicích kurz rentgenové spektrometrie. Odborná náplň kurzu byla věnována třem oblastem:

1. Energeticko-dispersní rentgenová spektrální analýza.
2. Nové metodiky přípravy vzorku pro rtg. spektrální analýzu.
3. Současná přístrojová technika předních světových firem vyrábějících rtg. spektrometry.

Kurzu se účastnilo 47 pracovníků. Garantem kurzu byla Dr.Jaroslava Waňková, CSc.

Odborná skupina hmotnostní spektrometrie

12.pracovní schůze se konala dne 15.12.1981 ve Výzkumném ústavu pro farmacii a biochemii v Praze.

Schůzi připravil a řídil Dr.Miroslav Ryska, CSc.

Byly předneseny přednášky:

Roman B a š t a, Miloslav K a š í k, Tesla-Vakuová technika, Praha: Teorie a vlastnosti kvadrupolových hmotnostních spektrometrů.

Základní fyzikální princip hmotnostní spektrometrie je pohyb iontu v elektrickém a magnetickém poli. Podle prostorového uspořádání a čas-

vého průběhu těchto polí lze rozdělit hmotnostní spektrometry do několika skupin. Kvadrupólové hmotnostní spektrometry patří do skupiny dynamických hmotnostních spektrometrů se stabilní drahou. Pohybové rovnice iontů v poli kvadrupólu mají tvar Mathieuových rovnic. Na základě vlastností řešení těchto rovnic lze najít pomocí diagramu stability takové pracovní podmínky /tj. frekvenci a amplitudu napájecího napětí elektrod/, při kterých dochází k separaci iontů podle jejich hmotností /resp. podle m/e /. Kvadrupólové hmotnostní spektrometry se v praxi obvykle realizují čtyřmi rovnoběžnými elektrodami kruhového nebo hyperbolického průřezu. Aby se dosáhlo požadované rozlišovací schopnosti, musí každý iont v poli kvadrupólu strávit dostatečný počet period vysokofrekvenčního pole, což zaručí, že dojde k separaci iontů. Délka elektrod, jejich poloměr a vzájemná vzdálenost, frekvence a napětí elektrod proto musí vyhovovat určitým relacím, jejichž splnění je podmínkou dosažení zvolených parametrů kvadrupólu. Nepříznivě ovlivňují vlastnosti kvadrupólu okrajová rozptylová pole na vstupu a výstupu. Při požadavku vysokých rozlišovacích schopností je nutné snížit jejich vliv na minimum vhodným přizpůsobením především na vstupu do kvadrupólu.

Václav Z i k e š , Tesla-Vakuová technika, Praha: Kvadrupólové hmotové spektrometry pro analýzu plynů.

V současné době se kvadrupólové hmotnostní spektrometry stávají jedním z nejdůležitějších elektronických vakuových analytických přístrojů s velmi širokým využitím v mnoha oborech vědy a techniky, lékařství, kontrole čistoty ovzduší apod. Kvadrupólové hmotnostní spektrometry se používají pro analýzu pevných, kapalných a plyných látek; jejich nejčastějším použitím je analýza plynů. Popisují se dvě nejrozšířenější oblasti užití kvadrupólových hmotnostních spektrometrů pro analýzu plynů, a to analýza zbytkových plynů ve vakuových systémech a v nejnovejší době vypracovaný způsob analýzy plynů za atmosférického tlaku. Podrobněji se diskutuje ionizace plynů v iontovém zdroji kvadrupólového hmotnostního spektrometru a řešení napouštěcího systému. Stručně se popisuje uspořádání kvadrupólového hmotnostního spektrometru QHS 100 pro analýzu plynů za atmosférického tlaku, který byl realizován v našem podniku. Rozsah hmotností je od 1 do 100 atomových hmotnostních jednotek, rozlišovací schopnost je jednotková v celém rozsahu hmotností. Údaj hmotnostního čísla a velikost iontového proudu jsou znázorněny přímo na dvou číslicových displejích. Kvadrupólový hmotnostní spektrometr je čerpán iontově sorpční vývěvou.

Pavel H e d b á v n ý , Tesla-Vakuová technika, Praha: Hmotnostní kvadrupólová spektrometrie sekundárních iontů.

Hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů /SIMS/ je povrchově analytická metoda založená na sekundární ion-iontové emisi. Informační hloubka metody je 1-3 monovrstvy, citlivost 10^{15} až 10^{13} atom/cm³.

V analyzátoch SIMS jsou sekundární ionty analyzovány podle poměru hmotnosti a náboje a navíc ve většině případů též podle energie. Nejvíce užívaným hmotnostním spektrometrem v zařízeních SIMS je v současné době kvadrupólový spektrometr. V kvadrupólové hmotnostní spektrometrii jsou při interpretaci spekter největším problémem hmotnostní interference. K rozlišení jednotlivých komponent píků tvořených více slož-

kami používáme zvýšeného tlaku kyslíku v pracovní komoře /při analýze pozitivních sekundárních iontů/, energetické analýzy popř. analýzy polymolekulárních iontů emitovaných z čistého povrchu. Při kvantitativní analýze není možné přímé určení koncentrace sledovaných příměsí jednoduchým výpočtem na základě existujících teoretických modelů. Nejužitebnějším způsobem kvantitativní interpretace spekter SIMS je využití LTE teorie a kalibrovaných standardů.

V závěru jsou uvedeny nejdůležitější aplikace metody SIMS v elektronice, metalurgii, chemii, biologii a geologii.

Ivan K o r u n a , Výzkumný ústav pro farmacii a biochemii, Praha: 4. několikadenní setkání pracovní skupiny hmotnostní spektrometrie Chemické společnosti NDR.

Pravidelné 4. setkání hmotnostních spektrometrů z celé NDR se konalo ve dnech 30.11. až 4.12.1981 v rekreačním středisku odborů FDGB v Kyffhäuseru za účasti asi 80 odborníků v oboru hmotnostní spektrometrie. Jako zahraniční hosté se na pozvání zúčastnili 4 vědeckí pracovníci z ČSSR. Na setkání bylo předneseno na 30 vědeckých sdělení a uspořádány 3 panelové diskuse na téma: 1/ Pokroky v organické hmotnostní spektrometrii, 2/ Isotopická hmotnostně spektrometrická analýza, 3/ Nomenklaturní otázky.

Těžiště přednášek spočívalo ve 3 základních oblastech: 1/ Stereoisomerní aplikace, 2/ Nové metody v organické hmotnostní spektrometrii, 3/ Isotopová analýza. Setkání bylo na dobré odborné, organizační i společenské úrovni a ilustrovalo vysokou úroveň hmotnostní spektrometrie v NDR.

Erratum:

V Bulletinu č. 34 byl uveřejněn souhrn přednášky "Zavádzanie ultrazvukom pripraveného aerosolu do plazmy cez spodnú elektrodu" a "Vplyv koncentrácie Na a Li na výkonnosť roztokovej spektrálnej analýzy". Autory sdělení jsou L. Koller, Katedra chemie Hutníckej fakulty VŠT Košice a J. Feješ, Ústav radioekologie a využitia jadrovej techniky, Košice.

/V Bulletinu bylo omylem vynecháno jméno druhého autora/.

KOMISE

Komise referenčních materiálů

Rozhodnutím hlavního výboru Čs. spektroskopické společnosti z prosince 1981 byla znovu zřízena komise referenčních materiálů, jejímž předsedou se stal Ing. Ivan Obrusník, CSc., Ústav jaderného výzkumu, Řež. Jejím hlavním úkolem je zvýšení informovanosti členů o možnostech použití RM, o jejich dostupnosti, potřebě a certifikaci, o metodách jejich použití v analytické praxi apod.

Komise nejprve uspořádá dotazníkovou akci mezi členy, jejímž cílem bude zjištění současného stavu vybavenosti laboratoří RM a čistými chemikáliemi a zjištění potřeb RM a možnosti a metodiky stanovení prvků jednotlivými laboratořemi.

Komise pak bude takto získané informace dávat k dispozici jednotlivým členům Společnosti.

Přístrojová komise

Přístrojová komise hledá oblasti, ve kterých by mohla být více než dosud členům spektroskopické společnosti užitečná. Vedle tradiční zprostředkovatelské činnosti /uveřejňování nabídek a poptávek po spektrálních přístrojích, doplňcích, náhradních dílech v Bulletinu/ chtěla by přispět k širší výměně zkušeností s opravou přístrojů, možností náhrady dovážených dílů a součástek, atp. Oživení v této oblasti by chtěla katalyzovat novou dotazníkovou akci, nejprve v molekulové sekci. Komise chce dále vytvořit podmínky pro budování reprezentativního fondu firemní literatury v oblasti spektrálních přístrojů, který by byl členům společnosti snadno přístupný. Užší kontakt chce komise navázat také s podniky zahraničního obchodu, aby mohly být pružněji řešeny otázky dovozu přístrojů, příp. jejich servisu.

Přístrojová komise uvítá všechny poznámky, příspěvky či náměty pro její činnost, které laskavě zasílejte na adresu jejího vedoucího: ing. K. Volka CSc., Katedra analytické chemie VŠCHT, Suchbátarova 1905, 166 28 Praha 6.

Školská komise

Některé zajímavé tituly našich nakladatelství

Kryštof K.: Výpočetní a řídicí technika
SNITL, váz. asi 63 Kčs

Hulínský V., Jurek K.: Zkoumání látek elektronovým paprskem
/Moderní metody v chemické laboratoři sv. 38/
SNITL, váz. asi 47 Kčs

Slavíček E.: Výpočetní technika pro chemiky
SNITL, váz. asi 52 Kčs

Klub čtenářů technické literatury

Olehla M., Věchet V.: Řešení úloh matematické statistiky ve FORTRANu
NADAS, Váz. asi 42 Kčs

Reljič Ž., Makanec B.: Počítačový jazyk BASIC
ALFA, váz. asi 38 Kčs, překlad ze srbštiny

Vysokoškolská skripta - prodejna PF UJEP Brno-Kniha, Kotlářská 6,
602 00 Brno

Jonas J.: Hmotnostní spektroskopie v organické chemii /4,50 Kčs/
Toužín : Vibrační spektroskopie molekul a krystalů /6,50 Kčs/

v tisku:

Holík M.: Čtyři lekce z NMR spektroskopie

Holík M.: NMR spektroskopie pro chemiky

Havel J., Novotný I.: Programování ve FORTRANu pro chemiky

Plaketa Jana Marka Marci z Kronlandu udělena Dr. J. Litomiskému

Dne 10.12.1981 byla na valném shromáždění ČSSS v kinosále Technického muzea udělena plaketa Jana Marka Marci z Kronlandu Dr. Jaromíru Litomiskému za celoživotní práci v oboru spektrální analýzy. Plaketu předali jubilantovi místopředsedové společnosti prof. Eduard Pliško Dr.Sc a Dr. Alena Špačková CSc. Prof. Pliško v krátkém projevu vzpomněl jubilentovu pionýrskou práci na poli emisní spektrografie, jeho činnost ve Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze, předchůdce nynější Čs. spektroskopické společnosti.

Dr. Jaromír Litomiský se narodil 29.3.1914 v Praze, kde vyrůstal a později studoval. Po absolvování Vyšší státní průmyslové školy chemické v roce 1933 pracoval jako chemik-analytik. Matematicko fyzikální fakultu KU vystudoval při zaměstnání v letech 1948-1953 a zakončil ji diplomovou prací v oboru emisní spektrální nevodivých látek. Výzkumnou práci započal v roce 1946 ve Spolku pro chemickou a hutní výrobu v Rybitví. Tam byl přidělen do spektrografické laboratoře, kde pod vedením Dr. Wanky a za podpory Prof. Böhma pronikl do základů a problematiky kvalitativní a kvantitativní emisní a absorpční spektrální analýzy. Vypracoval zde některé postupy pro kontrolu léčiv a jiných produktů. Své odborné specializaci zůstal věren i na novém pracovišti v Ústavu nerostných surovin v Kutné Hoře. Jeho laboratoř získala pověst pracoviště produkujícího mimořádně přesné a spolehlivé výsledky. Dokončené kvantitativní a kvalitativní metodiky publikoval v našich i cizích časopisech. Během své práce v ÚNS zdokonalil metodu kvalitativní spektrální analýzy vyhodnocování 45 prvků s polokvantitativní přesností, která se používá dosud. Vypracoval řadu kvantitativních spektrochemických metod. Při metalometrických prospekcích použil laboratorně zhotovenou SPD škálu, s jejíž pomocí značně zpřesnil a urychlil dosavadní způsob vyhodnocování. Pro školení pracovníků laboratoří Geologického průzkumu napsal v r.1960 se spolu-pracovníky z Ústředního ústavu geologického Praha skripta o spektrální analýze nevodivých látek. Vedle své činnosti ve Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze, později ČSSS, pracoval i v komisi pro spektroskopii ČSAV až do roku 1970, kdy požádal o zproštění z funkcí ze zdravotních důvodů.

Za své činnosti navštívil jubilant Polské spektrografické laboratoře ve Varšavě a Krakově, zúčastnil se 3. Polské spektroskopické konference v roce 1961, XIV. Colloquia Spectroscopica Internationale v Debrecenu - 1967 a na pozvání maďarských spektroskopiků V. kongresu pro zkoušení materiálů v Budapešti - 1970. Na doporučení výboru Čs. spektroskopické společnosti byl přizván v r.1966 prof. Dr. T. Törökem a Dr. H. Moritzem ke spolupráci na spektroskopickém slovníku /české části/, který vyšel v r.1970 ve VEB Verlag Technik Berlin jako prvý osmijazyčný slovník.

Předsednictvo ČSSS se rozhodlo udělit Dr. Litomiskému plaketu Jana Marka Marci za jeho celoživotní práci v spektrální analýze a za jeho obětavou činnost ve Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze a Československé spektroskopické společnosti při ČSAV.

VELIČINY A JEDNOTKY SVĚTLA A ELEKTROMAGNETICKÉHO ZÁŘENÍ

Překlad: Milena Závětová a Vladimír Vorlíček

Úvod

Tento dokument, obsahující tabulku veličin a jednotek světla a příbuzného elektromagnetického záření, je šestou částí normy ISO 31, která se týká veličin a jednotek užívaných v různých odvětvích vědy a techniky.

Uspořádání tabulek

Tabulky veličin a jednotek jsou v ISO 31 uspořádány tak, že veličiny jsou uvedeny na levých stránkách a jednotky na příslušných pravých stránkách. Všechny jednotky mezi dvěma plnými čarami patří k veličinám uvedeným mezi odpovídajícími čarami na levé straně. Tam, kde bylo číslování položek v opravě části ISO 31 změněno, je číslo z předchozího vydání uvedeno v závorce vlevo pod novým číslem veličiny.

Tabulky veličin

Jsou shromážděny nejdůležitější veličiny z oboru včetně svých označení a ve většině případů i definic. Tyto definice jsou uváděny pouze pro identifikaci; není účelem uvádět úplný výčet. Je upozorněno na vektorový charakter některých veličin, zejména vyžadují-li to jejich definice, nebylo však usilováno o úplnost ani konsistenci. Ve většině případů je pro veličinu uveden jen jeden symbol ^{1/}, tam, kde jsou uvedeny dva nebo více symbolů, aniž by byly speciálně rozlišeny, jsou ekvivalentní.

1/ Existují-li dva typy symbolů /např. $\theta, \theta, \varphi, \Phi$ / je uváděn jen jeden, což ovšem neznamená, že druhý není stejně vhodný.

Tabulky jednotek

Jednotky pro příslušné veličiny jsou uvedeny spolu s mezinárodním označením a definicemi. Jednotky jsou uspořádány následovně:

- 1/ Názvy SI jednotek jsou vtištěny většími typy než ostatní text. Zejména tyto jednotky spolu se svými dekadickými násobky a zlomky jsou doporučeny. Dekadické násobky a zlomky nejsou výslovně uváděny.
- 2/ Názvy jiných než SI jednotek, které mohou být užívány spolu s SI jednotkami pro svůj praktický význam nebo užití ve speciálních odvětvích, jsou tištěny normálními typy /velikost jako ostatní text/.
- 3/ Jednotky, které mohou být užívány dočasně spolu s SI jednotkami, jsou vtištěny malými typy /menšími než ostatní text/. Jednotky tříd 2 a 3 jsou od SI jednotek odděleny přerušovanou čarou.
- 4/ Jednotky, které nemají být používány spolu s SI jednotkami, jsou v některých částech ISO 31 uvedeny v dodatcích. Dodatky nejsou součástí standardů. Jsou uspořádány do tří skupin:
 - a/ Jednotky CGS se speciálními názvy. Doporučuje se neužívat speciální názvy a symboly CGS spolu s SI jednotkami.
 - b/ Jednotky založené na stopě, libře a sekundě a některé jiné jednotky.

c/ Jiné jednotky. Tyto jsou uváděny pro informaci, zpravidla s ohledem na převodní faktor. Zejména se nedoporučuje použití jednotek označených ⁺.

Poznámka o doplňkových jednotkách

Generální konference měř a vah označila SI jednotky radian a steradian za doplňkové, úmyslně nechávajíc otevřenou otázku, zda jsou základními nebo odvozenými jednotkami, a tedy mají-li být rovinný a prostorový úhel považovány za základní nebo odvozené veličiny. V ISO 31 jsou rovinný a prostorový úhel užívány jako odvozené veličiny. V ISO 31 jsou definovány jako poměry dvou délek nebo dvou ploch, a proto jsou užívány jako bezrozměrné veličiny. I když při tomto použití je koherentní jednotkou pro obě veličiny číslo 1, v mnoha praktických případech je vhodné místo čísla 1 užívat speciálních názvů radian a steradian. Kdyby byly rovinný a prostorový úhel užívány jako základní veličiny, jednotky radian a steradian by byly základními jednotkami a mohly by být považovány za speciální názvy pro číslo 1. Takové použití by si vyžádalo rozsáhlé změny v ISO 31.

Počet číslic v numerických údajích ^{1/}

Všechna čísla ve sloupci "Definice" jsou přesná. Ve sloupci "Převodní vztahy" jsou převodní vztahy, na nichž je založen výpočet jiných jednotek, obvykle uváděny na sedm platných míst. Jsou-li přesné a obsahují sedm nebo méně cifer, je slovo "přesně" uvedeno tam, kde to není z kontextu zřejmé. Mohou-li být přesně určeny pomocí více než sedmi cifer, mají být uvedeny celé. Jsou-li převodní faktory odvozeny z experimentu, jsou uváděny s počtem platných cifer, oprávněných přesností experimentu. Obecně to znamená, že pouze poslední místo je nejisté. Když však experiment zaručuje víc než sedm cifer, je faktor obvykle zaokrouhlen na sedm platných míst. Ostatní převodní faktory jsou udány na nejvýše šest platných míst, jsou-li známy přesně a obsahují šest nebo méně cifer, je slovo "přesně" přidáno tam, kde to není jasné ze souvislosti. Čísla ve sloupci "Poznámky" jsou udána s přesností odpovídající každému jednotlivému případu.

1/ Desetinou značkou je čárka. V anglicky psaných textech lze užit buďto čárky nebo tečky.

Speciální poznámky

Tento dokument obsahuje výběr veličin souvisejících se světlem, mnohé z nich jsou vhodné pro celý obor elektromagnetického záření. Pro světlo jsou uváděny hlavně fotometrické veličiny. V několika případech je stejného označení užito pro dvojici odpovídajících zářivých a světelných veličin s tím, že všude tam, kde by mohlo dojít k nejasnostem, o kterou veličinu se jedná, bude doplněn index e /energetická/ nebo v /viditelná/. V tomto dokumentu spektrální koncentrace vzhledem k vlnové délce odpovídají několika veličinám. Definice je explicitně uvedena v 6 - 8.1 a ve vztahu k 6 - 7.1 je uvedena v poznámkách. Ostatní spektrální koncentrace jsou označeny rovnicemi ve

sloupci "Poznámky". Index λ je užíván jako část symbolu označující, že veličina má rozměr derivace podle λ . Spektrální koncentrace ve smyslu frekvence nebo vlnového čísla je definována a označena podobně, index λ je nahrazen ν nebo σ . Místo spektrální koncentrace se též užívá názvu rozdělovací funkce, např. frekvenční rozdělovací funkce. Jméno veličiny, která je spektrální koncentrací, lze zkrátit, nahradíme-li slova "spektrální koncentrace" adjektivem "spektrální", např. spektrální koncentrace hustoty zářivé energie může být nazývána spektrální hustotou zářivé energie. Adjektivum "spektrální" je též užíváno k označení veličin, které jsou funkcí vlnové délky /nebo frekvence, příp. vlnočtu/, které však nejsou spektrální koncentrací, např. spektrální emisivita, viz 6 - 18.2. Funkční závislost je obvykle označena přidáním λ /nebo ν , příp. σ / do závorek jako část symbolu, např.

$$E / \lambda / .$$

Poznámka překladatelů

Symbole některých veličin, případně jejich ekvivalenty, tak jak jsou uvedeny v této normě, nejsou ve shodě se zvyklostmi ve spektrální analýze a s normou IUPAC pro spektroskopii a spektrální analýzu. Proto recenzent překladu doplnil překlad vysvětlujícími poznámkami, které jsou připojeny za tabulkou. Odkazy na ně jsou provedeny písmeny latinské abecedy ve sloupci "Poznámky".

6. Světlo a elektromagnetické záření

čís.	veličina	značení	definice	poznámky
6-1.1	kmitočet frekvence	f, ν	počet cyklů v časové jednotce	a/
6-2.1	kruhová frekvence	ω	$\omega = 2\pi \nu$	
6-3.1	vlnová délka	λ	nejmenší vzdálenost dvou bezprostředně za sebou následujících bodů se stejnou fází /v téže okamžiku/	vlnová délka v prostředí se rovná vlnové délce ve vakuu, dělené indexem lomu prostředí /viz 6-33.1/
6-4.1	vlnčet, vlnové číslo,	σ	$\sigma = 1 / \lambda$	v molekulární spektroskopii se též užívá $\tilde{\nu}$ pro ν/c b/
6-4.2	kruhový vlnčet	k	$k = 2\pi \sigma$	
6-5.1	rychlost šíření elektromagnetických vln ve vakuu	c, c_0		$c = 2,99792458 \pm 0,00000012 \cdot 10^8 \text{ m/s}^1$ někdy je c užíváno pro fázovou rychlost v prostředí, v tom případě c_0 značí rychlost ve vakuu c/
6-6.1	zářivá energie	Q, W /U, Q_e /	energie vyzařovaná, přenášená nebo přijímaná jako záření	d/
6-7.1	hustota zářivé energie	w, /u/	zářivá energie v určitém objemu, dělená tímto objemem	pro nepolarizované záření černého tělesa /celkové/ $w_\lambda = 8\pi hc \cdot f / \lambda, T /$ a $w = \frac{4\sigma}{c} T^4$ pro $f / \lambda, T /$ a σ , viz 6-16.1, 6-17.1 a 6-15.1 $w = \int w_\lambda d\lambda$ Viz též úvod, speciální poznámky e/
6-8.1	spektrální koncentrace hustoty zářivé energie /vztažená k vlnové délce/, spektrální hustota zářivé energie /vztažená k vlnové délce/	w_λ	hustota zářivé energie v nekonečně malém intervalu vlnových délek, dělená velikostí tohoto intervalu	
6-9.1	zářivý tok, zářivý výkon	$P, \Phi,$ / Φ_0 /	výkon vyzařovaný, přenesený nebo přijímaný ve formě záření	$\Phi = \int \Phi_\lambda d\lambda$ f/

1/ CODATA Bulletin 11 /1973/. K všeobecnému použití doporučeno CGPM.

čís.	název jednotky	mezinárodní symbol jednotky	definice	převodní faktory	poznámky
6-1.a	hertz	Hz	$1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$		
6-2.a	převrácená sekunda, sekunda na méně prvou, radian za sekundu	s^{-1} rad/s			
6-3.a	metr	m			
	angström	Å	$1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$	$1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ /přesně/	$10 \text{ Å} = 1 \text{ nm}$
6-4.a	převrácený metr, metr na méně prvou	m^{-1}			často se užívá násobek cm^{-1}
6-5.a	metr za sekundu	m/s			
6-6.a	joule	J			
6-7.a	joule na krychlový metr	J/m^3			
6-8.a	joule na čtvrtou mocninu metru	J/m^4			
6-9.a	watt	W	$1 \text{ W} = 1 \text{ J/s}$		

čís.	veličina	zna- čení	definice	poznámky
6-10.1	hustota zářivého toku	φ, ψ	zářivý tok dopadající na malou kouli, dělený průřezem této koule	$\varphi = \int \varphi_{\lambda} d\lambda$ v isotropním homogenním poli záření je φ/c hustota energie, ozáření povrchu je $\varphi/4$
6-11.1	zářivost	I, /I _e /	zářivý tok, ze zdroje nebo elementu zdroje v daném směru do elementu prostorového úhlu, který obsahuje daný směr, dělený elementem prostorového úhlu	$I = \int I_{\lambda} d\lambda$ g/
6-12.1	zář	L, /L _e /	zářivost elementu povrchu v bodě povrchu a v daném směru, dělená plochou průmětu tohoto elementu do roviny kolmé k danému směru	$L = \int L_{\lambda} d\lambda$ pro nepolarizované záření černého tělesa /celkové/ $L_{\lambda} = \frac{c}{4\pi} w_{\lambda} = 2hc^2 \cdot f/\lambda, T/$ a $L = \frac{\sigma}{\pi} T^4$ Pro $f/\lambda, T/$ a σ , viz 6-16.1, 6-17.1 a 6-15.1.
6-13.1	/intenzita/ vyzařování	M /M _e /	zářivý tok, opouštějící element povrchu v bodě povrchu, dělený plochou tohoto elementu	dřívější název - zářivá emisivita $M = \int M_{\lambda} d\lambda$ pro nepolarizované záření černého tělesa /celkové/ $M_{\lambda} = \frac{c}{4} w_{\lambda} = 2\pi hc^2 \cdot f/\lambda, T/$ a $M = \sigma T^4$ Pro $f/\lambda, T/$ a σ , viz 6.16.1, 6-17.1 a 6.15.1
6-14.1	intenzita ozáření, ozářenost	E /E _e /	zářivý tok, dopadající na element povrchu v určitém bodě, dělený plochou tohoto elementu	$E = \int E_{\lambda} d\lambda$ h/
6-15.1	Stefanova - Boltzmannova konstanta	σ	konstanta σ ve výrazu pro vyzařování černého zářiče /černého tělesa/ při termodynamické teplotě T: $M = \sigma T^4$	$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15 h^3 c^2} = 5,67032 \pm 0,00071/ \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$ 1/ k a h viz ISO 31/8 a ISO 31/9

čís.	název jednotky	mezinárodní symbol jednotky	definice	převodní faktory	poznámky
6-10.a	watt na metr čtvereční	W/m ²			
6-11.a	watt na stera- dian	W/sr			steradian - - viz úvod
6-12.a	watt na stera- dian metr čtvereční	W/(sr.m ²)			
6-13.a	watt na metr čtvereční	W/m ²			
6-14.a	watt na metr čtvereční	W/m ²			
6-15.a	watt na metr čtvereční kelvin na čtvrtou	W/(m ² K ⁴)			

čís.	veličina	zna- čení	definice	poznámky
6-16.1	první radiační konstanta	c_1	konstanty c_1 a c_2 ve výrazu pro vyzařování černého zářiče /černého tělesa/ při termodynamické teplotě T: $M_\lambda = c_1 f(\lambda, T) = c_1 \frac{1}{\lambda^5 \exp(c_2/\lambda T) - 1}$	$c_1 = 2\pi^5 hc^2 / 15 = 3,741832 \pm 0,000020 / \times 10^{-16} \text{ W m}^2 / \text{m}^2$ Název první radiační konstanta byl též užíván pro faktory $8\pi^5 hc$ a hc^2 v příslušných výrazech pro w_λ a L_λ /viz též poznámku 6-8.1 a 6-12.1/.
6-17.1	druhá radiační konstanta	c_2		$c_2 = \frac{hc}{k} = 1,438786 \pm 0,000045 / \times 10^{-2} \text{ m K}$ 1/ K vyjádření teplot v "Mezinárodní praktické teplotní stupnici z roku 1968", zavedené mezinárodní komisí pro míry a váhy, se má užívat numerické hodnoty $1,4388 \times 10^{-2}$
6-18.1	emisivita	ϵ	poměr vyzařování tepelného zářiče k vyzařování černého zářiče /černého tělesa/ při téže teplotě	bezrozměrné veličiny
6-18.2	spektrální emisivita, emisivita při určité vlnové délce	$\epsilon(\lambda)$	poměr spektrální koncentrace vyzařování tepelného zářiče ke spektrální hustotě vyzařování černého zářiče /černého tělesa/ při téže teplotě	spektrální emisivita je funkcí vlnové délky; to je vyznačeno symbolem $\epsilon / \lambda /$
6-18.3	směrová spektrální emisivita	$\epsilon(\lambda, \theta, \varphi)$	poměr spektrální hustoty záře v daném směru θ, φ tepelného zářiče ke spektrální hustotě záře černého zářiče /černého tělesa/	
6-19.1	svítivost	I_v $/I_v/$		viz též 6-20.1 $I = \int I_\lambda d\lambda$

čís.	název jednotky	mezinárodní symbol jednotky	definice	převodní faktory	poznámky
6-16.a	watt metr čtvereční	W m^2			
6-17.a	metr kelvin	m K			
6-19.1	kandela	cd	kandela je svítivost černého tělesa v kolmém směru k povrchu o velikosti $1/600000 \text{ m}^2$ při teplotě tuhnutí platiny a tlaku 101325 N/m^2 /paskalů/		

čís.	veličina	zna- čení	definice	poznámky
6-20.1	světelný tok	Φ , $/\Phi_V/$	světelný tok $d\Phi$ zdroje o svítivosti I do elementu prostorového úhlu $d\Omega$ je $d\Phi = I d\Omega$	$\Phi = \int \Phi_\lambda d\lambda$ světelný tok Φ váže se spektrálním zářivým tokem $\Phi_{e\lambda}$ vztah $\Phi = \int K/\lambda / \Phi_{e\lambda} d\lambda$, kde K/λ / je světelná účinnost Viz 6-26.2 a 6-27.2. i/
6-21.1	světelné množství	Q , $/Q_V/$	časový integrál světelného toku	$Q = \int Q_\lambda d\lambda$
6-22.1	jas	L , $/L_V/$	svítivost elementu povrchu v bodě povrchu a v daném směru, dělená průmětem tohoto elementu do roviny kolmé v daném směru	$L = \int L_\lambda d\lambda$ j/
6-23.1	světlení	M , $/M_V/$	světelný tok vystupující z elementu povrchu v uvažovaném bodě, dělený plochou tohoto elementu	dříve nazýváno světelná emisivita $M = \int M_\lambda d\lambda$ k/
6-24.1	osvětlení, intenzita osvětlení, osvětlenost	E , $/E_V/$	světelný tok dopadající na element povrchu v daném bodě, dělený plochou tohoto elementu	$E = \int E_\lambda d\lambda$ l/
6-25.1	osvit	H	$H = \int E dt$	
6-26.1	světelná účinnost složeného záření	K	$K = \Phi_V / \Phi_e$	$K = \frac{\int \Phi_{v\lambda} d\lambda}{\int \Phi_{e\lambda} d\lambda} = \frac{\int K/\lambda / \Phi_{e\lambda} d\lambda}{\int \Phi_{e\lambda} d\lambda}$
6-26.2	spektrální světelná účinnost záření	K/λ	$K/\lambda / = \Phi_{v\lambda} / \Phi_{e\lambda}$	význam K/λ / viz poznámku 6-18.2
6-26.3	maximální spektrální světelná účinnost záření	K_m	maximální hodnota K/λ /	pro monochromatické záření o frekvenci $540,015 \times 10^{12}$ Hz je spektrální světelný výkon roven 683 lm/W

čís.	název jednotky	mezinárodní symbol jednotky	definice	převodní faktory	poznámky
6-20.a	lumen	lm	1 lm = 1 cd.sr		
6-21.a	lumen sekunda	lm.s			
6-21.b	lumen hodina	lm.h		1 lm.h = 3600 lm.s /přesně/	
6-22.a	kandela na metr čtvereční	cd/m ²			
6-23.a	lumen na metr čtvereční	lm/m ²			
6-24.a	lux	lx	1 lx = 1 lm/m ²		
6-25.a	lux sekunda	lx.s			
6-25.b	lux hodina	lx.h		1 lx.h = 3600 lx.s /přesně/	
6-26.a	lumen na watt	lm/W			

čís.	veličina	zna- čení	definice	poznámky
6-27.1	poměrná světelná účinnost složeného záření	V	$V = K/K_m$	bezrozměrné veličiny $V = \frac{\int v/\lambda / \Phi_{e\lambda} d\lambda}{\int \Phi_{e\lambda} d\lambda}$
6-27.2	poměrná spektrální světelná účinnost záření	$v/\lambda /$	$v/\lambda / = \frac{K/\lambda /}{K_m}$	Pro označení $v/\lambda /$ viz poznámku 6-18.2. $\Phi_v = \int K/\lambda / \Phi_{e\lambda} d\lambda = K_m \int v/\lambda / \Phi_{e\lambda} d\lambda$ Standardní hodnoty $v/\lambda /$ vztahované k oku adaptovanému na světlo byly přijaty Mezinárodní komisí pro osvětlení 1971 a schváleny Mezinárodní komisí pro míry a váhy 1972. /Procès-Verbaux du CIPM 40 /1972/, 29, 145/.
6-28.1	barevné podněty /CIE/ spektrální barvy, trichromatické členitelné CIE, křivky citlivosti oka k barvám	$\bar{x}/\lambda /,$ $\bar{y}/\lambda /,$ $\bar{z}/\lambda /$	Hodnoty barevných podnětů spektrální barvy v "CIE /XYZ/ trichromatickém systému" pro spektrální složky ekvivalentního spektra. Tyto funkce jsou použitelné při zorných polích s úhlem záběru mezi 1° a 4° . Pro tento standardní kolorimetrický systém $\bar{y}/\lambda / \stackrel{\text{def}}{=} v/\lambda /$	bezrozměrné veličiny dříve CIE rozdělovací koeficienty Roku 1964 CIE přijala dodatečný standardní kolorimetrický systém s hodnotami barevných podnětů spektrální barvy $\bar{x}_{10}/\lambda /, \bar{y}_{10}/\lambda /, \bar{z}_{10}/\lambda /,$ použitelnými pro zorné pole s úhlem záběru mezi 1° a 4° .
6-29.1	barevné souřadnice, trichromatické souřadnice	$x, y,$ z	Pro relativní rozložení spektrální energie nebo výkonu $\varphi(\lambda)$ $x = \frac{\int \varphi(\lambda) \bar{x}/\lambda / d\lambda}{\int \varphi(\lambda) \bar{x}/\lambda / d\lambda + \int \varphi(\lambda) \bar{y}/\lambda / d\lambda + \int \varphi(\lambda) \bar{z}/\lambda / d\lambda}$ a podobně pro y a z . Pro světelné zdroje $\varphi(\lambda) = \frac{\Phi_{e\lambda}(\lambda)}{\Phi_{e\lambda}(\lambda_0)}$ /relativní spektrální zářivý tok/. Pro barvy předmětu je $\varphi(\lambda)$ dáno jedním ze tří součinů $\varphi(\lambda) = \frac{\Phi_{e\lambda}(\lambda)}{\Phi_{e\lambda}(\lambda_0)} \cdot \begin{cases} \varphi(\lambda) \\ \tau(\lambda) \\ \beta(\lambda) \end{cases}$	bezrozměrné veličiny $\varphi/\lambda /$ je trichromatická křivka, λ_0 je referenční vlnová délka

čís.	název jednotky	mezinárodní symbol jednotky	definice	převodní faktory	poznámky

čís.	veličina	zna- čení	definice	poznámky
6-30.1	spektrální součinitel absorpce, poměrná spektrální pohltivost, spektrální absorptance	α/λ	Poměr spektrální hustoty zářivého nebo světelného toku, který je pohlcen, k toku dopadajícího záření.	bezrozměrné veličiny Význam α/λ atd. viz poznámku 6-18.2.
6-30.2	spektrální součinitel odrazivosti, poměrná spektrální odrazivost	ρ/λ	Poměr spektrální hustoty zářivého nebo světelného toku odraženého k dopadajícímu.	Symbole α, ρ, τ a β jsou užívány pro vážené průměry α/λ , ρ/λ , τ/λ a β/λ ; přídavné jméno spektrální se pak vynechává.
6-30.3	spektrální součinitel propustnosti, poměrná spektrální propustnost, spektrální transmitance	τ/λ	Poměr spektrální hustoty zářivého nebo světelného toku prošlého k dopadajícímu	Váha bude různá pro zářivé a světelné faktory
6-30.4	spektrální součinitel záře	β/λ	Poměr spektrální hustoty záře tělesa, které není samo zářičem, v bodě povrchu a v daném směru ke spektrální hustotě záře dokonalého rozptylovače za identických podmínek ozáření.	Viz též úvod.
6-31.1	lineární součinitel zeslabení, lineární extinkční koeficient	μ	Relativní pokles spektrální hustoty zářivého nebo světelného toku svazku rovnoběžných paprsků elektromagnetického záření při průchodu infinitezimální vrstvou prostředí, dělený délkou dráhy.	μ/ρ , kde ρ je hustota prostředí, se nazývá hmotnostní činitel zeslabení
6-31.2	absorpční koeficient	a	Ta část exponenciálního součinitele zeslabení, vyvolaná pohlcením záření.	a/ρ , kde ρ je hustota prostředí, se nazývá hmotnostní činitel pohlcení.

čís.	název jednotky	mezinárodní symbol jednotky	definice	převodní faktory	poznámky
6-31.a	převrácený metr, metr na méně prvou	m^{-1}			

čís.	veličina	zna- čení	definice	poznámky
6-32.1	molární absorpční koeficient	α	$\alpha = a/c$ kde c je koncentrace látky	Pro koncentraci lát- ky viz ISO 31/8. m/
6-33.1	index lomu	n	Poměr rychlosti elektro- magnetického záření ve vakuu k fázové rychlos- ti elektromagnetického záření dané frekvence v prostředí.	bezrozměrná veličina

čís.	název jednotky	mezinárodní symbol jednotky	definice	převodní faktory	poznámky
6-32.a	čtvereční metr na mol	m^2/mol			

Poznámky k tabulce

6-1.1

a/ Pro kmitočet jsou doporučeny jako ekvivalentní symboly f a ν . V praxi spektrální analýzy se však ustálil zvyk používat symbolu f pro obor velmi dlouhých vln, tedy malých kmitočtů, zejména v elektrotechnice /kmitočet střídavého proudu/, klasické radiofonii, v radiofrekvenční oblasti /např. kmitočet mikrovlnného generátoru označíme f /. Naproti tomu v oblasti "krátkých vln", tedy v oboru rotačně-vibračních spekter, v oboru atomových optických a rentgenových spekter značíme kmitočet ν . Odtud klasický vztah $\epsilon = h \cdot \nu$, nikoliv $\epsilon = h \cdot f$. Ostatně i v originálních rukopisech Plancka a Bohra je používáno symbolu ν , nikoliv f . S volbou symbolu ν pro kmitočet souvisí i volba symbolu λ pro vlnočet /viz poznámku b/.

6-4.1

b/ Vlnočet označený σ je reciproká hodnota libovolné vlnové délky. Ve spektroskopii užíváme vždy vlnovou délku ve vakuu, jejíž reciprokou hodnotou je vlnočet značený $\tilde{\nu} = \lambda_{\text{vak}}^{-1}$, respektive $\tilde{\nu} = \nu/c_0$, kde c_0 je rychlost záření ve vakuu a ν kmitočet záření. Zatímco kmitočet se při průchodu prostředím nemění, mění se vlnová délka a její reciproká hodnota - vlnočet. Třeba ještě dodat, že znak σ přisuzuje norma ISO také Stefan-Boltzmannově konstantě /viz 6-15.1/.

6-5.1

c/ Užívání dvou symbolů pro tutéž veličinu je nelogické. Jestliže c je výslovně rychlost ve vakuu, jak bychom značili rychlost záření v hmotném prostředí, např. ve standardním vzduchu? Praxe si nakonec vždy vynutí dvojí značení a pak by bylo logické ponechat pro rychlost ve vakuu symbol c a rychlost v hmotném prostředí indexovat, např. c_x , kde prostředí x , na něž se c_x vztahuje, by se definovalo ad hoc.

6-6.1

d/ Pro zářivou energii je uveden symbol Q , tentýž symbol je uveden také pro "množství světla". Rozlišení mezi analogickými veličinami zářivé energie a světla indexováním při zachování téhož symbolu, by bylo ideálním řešením a je naznačeno a doporučeno i ve spektrálně-analytické normě IUPAC. V této formě ISO je rovněž připuštěno jako jedno z možných řešení.

6-8.1

e/ Termínu "spektrální hustota zářivé energie" je rozhodně dáti přednost. "Spektrální koncentrace hustoty zářivé energie" je nesmyslně kumulovaný název.

6-9.1

f/ O symbolu zářivého toku platí totéž co o zářivé energii v poznámce d/. Tedy pro zářivý tok Φ_e a pro světelný tok Φ_v . Symbol P je odvozen z anglického Power, tedy výrazu pro výkon a v oboru spektroskopie není téměř používán.

6-11.1

g/ Zářivost a svítivost mají navrženy tytéž symboly. Doporučuji rozlišovat indexováním jako v předchozích případech. Totéž platí pro 6-12.1 Zář a pro 6-22.1 Jas.

6-14.1

h/ V názvu veličiny by na prvním místě mělo být "ozáření" značené E_e v analogii k osvětlení E_v /viz 6-24.1/.

6-20.1

i/ Vzhledem k rozlišování energetických a světelných veličin by věta měla znít: Světelný tok Φ_v váže se spektrálním zářivým tokem $\Phi_{e\lambda}$ vztah; $\Phi_v = \int K / \lambda / \cdot \Phi_{e\lambda} d\lambda$, kde $K / \lambda /$ je světelná účinnost.

6-22.1

j/ Viz poznámku g/, tedy L_v na prvním místě.

6-23.1

k/ M_v na prvním místě.

6-24.1

l/ Viz poznámku h/.

6-32.1

m/ Ve všech oborech absorpční spektrální analýzy se molární absorpční koeficient značí ϵ .

Vydává Československá spektroskopická společnost při ČSAV
adresa sekretariátu : 160 00 Praha 6, Kozlovská 1
za ČSSS zodpovídá Dr.B.Moldan, CSc
Redakce M.Večerková. Redakční uzávěrka únor 1982
Pouze pro vnitřní potřebu.