

Čs. spektroskopická spol.

PIČAV

KRÁLOVNA

Přiručka

45

BULLETIN

ČESKOSLOVENSKÉ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI PŘI ČSAV

ČÍSLO 5

PROSINEC 1969

~~Číslo 5 - Prosinec 1969~~
Prosinec 1969 - Prosinec 1969 123-2

Dne 4. dubna se konala 5. schůze Hlavního výboru Československé spektroskopické společnosti. Z usnesení schůze vyjímáme:

1. Vzhledem k studijnímu pobytu předsedy ČSSS prof. dr. J. Plívy DrSc. v zahraničí pověřuje HV řízením společnosti dosavadního místopředsedu doc. ing. E. Plško DrSc. a to do návratu prof. Plívy anebo do skončení volebního období. Funkci místopředsedy přejímá člen HV dr. J. Litomiský.

2. Za dr. K. Ulberta, člena revisní komise ČSSS, který je na dlouhodobé stáži v zahraničí, doporučuje HV ČSSS přeřadit ing. I. Kleinmanna z funkce náhradníka do funkce člena revisní komise.

3. Pro zkvalitnění činnosti obou sekcí společnosti, která bude zřízením zájmových skupin podstatně složitější usnáší se HV na následujících opatřeních:

- a) Rozšiřuje vedení sekcí z dosavadního počtu dvou členů na větší počet podle vlastních potrieb jednotlivých sekcí. V čele každej sekce bude reprezentatívny orgán, složený z predsedy a členů, ktorí budú súčasne zastávať funkcie vedoucích v jednotlivých zájmových skupinách.
- b) Do reprezentácie sekcí budú ďalší členové oficiálne instalováni vždy po zriadení príslušných zájmových skupín

HV sa na 5. schůzi zabýval predovšetím otázkami spojenými s federalizáciou Československej akadémie vied a s ní spojenou otázkou federalizácie ČSSS. Základné stanovisko bude zaujať po vydaní príslušných zákonů a smerníc, pravdepodobne ešte v tomto roku. Ďalej HV projednával radu potíží, ovplyvňujúcich prácu spoločnosti v súčasnej dobe, predovšetím potíže s umiestnením sekretariátu, složitou a obtížne riešiteľnou situáciou pri spolupráci s tiskárňami, problémy administratívnej práce ap. Bola prijata usnesení a projednána opatrenia, ktorá by dovoľovala prácu spoločnosti podstatne zkvalitniť najpozději již v príštím roku.

HV sa obracia touto cestou na všetky zájemcov o prácu spoločnosti a na všetky členy ČSSS se žadostí, aby, pokiaľ tak již nečinili dříve, zaslali na adresu sekretariátu vyplnené dotazníky a uhradili členské príspevky.

Počínajúc Bull. č. 5 upouštíme od uvádzania titulů autorů prednášiek, jak je bežné v odbornej literatúre.

M. Horák
v. d. tajník ČSSS

ATOMOVÁ SEKCE

Ve dňoch 13. a 14. března 1969 sa konala v zasedacích miestnosti Ústavu SAV v Bratislave 7. pracovná schůza atomovej sekcie. V prvej časti schůzy 13. března byly zařazeny tyto přednášky:

E. Plško, Ústav anorg. chemie SAV, Bratislava: Zdroje chýb a rušivé vplyvy v spektrochemickej analýze

Po definovaní základných parametrov hodnotiacich spektrochemickú analýzu sa rozoberajú príčiny ovplyvňujúce spoľahlivosť, t. j. presnosť a správnosť dosiahnutých výsledkov. Postupuje sa systematickým rozborom jednotlivých logicky súvisiacich základných operácií vyskytujúcich sa pri tejto analytickej metóde.

Pri odbere vzorky je potrebné zaistiť najmä jej reprezentatívnosť. Uvádzajú sa podmienky, ktoré je potrebné k tomu zachovať a to ako pre nevodivé, tak i pre vodivé - kovové vzorky. Pri príprave štandardov sa poukazuje na ich odlišnosť od normálov analyzovaných inými metódami. Čo sa týka úpravy vzorky, treba sa vystríhať najmä chýb vznikajúcich pri použití obohacovacích postupov.

Ďalej sa hodnotí výber porovnávacích prvků a účinnosť metódy vnútorného porovnávacieho prvků. V procese budenia, najmä keď sa používajú kontinuálne metódy vnášania vzorky do výboja, hrá veľkú úlohu jej zrnitosť. V poslednej kapitole venovanej možným chybám vznikajúcim pri detekcii spektra sa diskutujú chyby vznikajúce z posobenia pozadia a to ako pri fotografickom, tak i pri fotoelektrickom postupe.



J. Stachová, E. Plško, Ústav anorg. chemie SAV, Bratislava:
Podmienky výberu porovnávacích čiar v spektrochemickej analýze

Práce bola zameraná na výber dvojíc spektrálnych čiar.

Sledovala sa presnosť spektrochemického stanovenia obsahu Co za použitia Ni ako vnútorného porovnávacieho prvku. Boli zostrojené analytické krivky pre každú čiaru Co za použitia všetkých čiar Ni ako porovnávacích a opačne. Smernice takto získaných sád analytických kriviek udávajú príslušné hodnoty koeficientu b . Z 30-krát opakovane nasnímkovaného spektra vzorky o zložení Co : Ni = 1 : 1 sa zostrojili pre tri dvojice spektrálnych čiar rozptylové diagramy a vypočítali sa štandardné odchýlky $\sigma_{\Delta Y}$. Z vykonanej štatistickej analýzy vyplýva, že najlepšia reprodukovateľnosť charakterizovaná najnižšou štandardnou odchýlkou sa dostane v prípade rovnosti budiacich potenciálov, ak aj rovnosťou konštánt b pre zvolené dvojice čiar, ako to vyplýva z teoretického hodnotenia korelácie intenzity spektrálnych čiar uvedeného v úvode práce. Mechanické splnenie rovnosti len budiacich potenciálov nezaručuje získanie optimálnej presnosti analýzy. Pri výbere vhodných dvojíc spektrálnych čiar je potrebné dodržať nielen rovnosť budiacich potenciálov, ale je potrebné urobiť aj analýzu na rovnosť konštánt b .



14. března byly předneseny tyto referáty:

V. Vukanovič, Universita Beograd: Die Anwendung von Fremdmagnetfeldern bei der Spurenanalyse im Lichtbogen

Přednáška pojednávala o vlivu magnetického pole na tvar obloukového plasmatu a na buzení prvků.



D. Vukanovičová, Universita Beograd: Zur Rolle der Masse beim Entmischungseffekt im Gleichstrombogen

Pokračování předešlé práce, která jedná o přezkoušení různých vlivů v obloukovém plasmatu při zavedení magnetického pole, zejména vlivu hmoty při odměšovacímu efektu ve stejnosměrném oblouku.



M. Matherny, VŠT Košice: Programové riešenie výpočtu priebehu analytickej priamky

Priebeh analytickej priamky je jednoznačne definovaný jej smernicou, ako aj priesečíkom tejto priamky s osou, na ktorú sú nanesené hodnoty ΔY . Matematické riešenie úlohu sa zakladá na princípe minimalizácie tejto funkcie použitím metódy najmenších štvorcov. Aplikácia tejto metódy umožnila však získať vedľa konkrétnych bodov, vyplývajúcich z experimentálnych meraní, aj im prislúchajúce teoretické hodnoty, čo zase ďalej umožnilo spočítať príslušné odchýlky, z týchto smerodatné odchýlky a zo smerodatných odchýliek ďalšie štatistické údaje. Program v konečnej forme okrem základných parametrov analytickej priamky poskytuje informáciu o: korelácii, stupňa determinácie, smerodatnej odchýlky korelačného koeficientu, smerodatnej odchýlky základných parametrov, ako aj všetkých experimentálne meraných hodnot. Program sa hodí na testovanie matricefektu ako aj na testovanie vplyvu kontaminácie syntetickej bázy jak pri roztokových, tak aj práškových analytických metódach. Výpočtový program je evidovaný na katedre pod číslom AĽ-IM-69.



V rámci 7. pracovní schůze atomové sekce ČSSS byla dne 13. března uspořádána informační schůze zájemců o práci zájmových skupin. Při této příležitosti byly předneseny dva referáty:

B. Polej, M. Švejda, VŠChT Praha: Korelace intenzit analytického páru čar v prostoru mezi elektrodami

Plasma elektrických výbojů (oblouk, jiskra) v prostoru mezi elektrodami není zářičem rovnoměrného jasu. Podle axiálního a radiálního rozložení atomu určeného a porovnávacieho prvku a podle rozdělení teploty vykazuje záření vysílané z jednotlivých zón zdroje různý stupeň korelace intenzit analytického páru čar. Jev demonstrován na stanovení manganu v oceli (standard nízkolegované oceli Poldi SK 133) při uspořádání elektrod "hrot proti ploše" a sledován v závislosti na tvaru měděné protielektrody. Prostor mezi elektrodami byl rozdělen na 5 stejných zón obdélníkovým otvorem clony mezizobra-

zení. Stupeň korelace intenzit analytického páru čar byl sledován v jednotlivých zonách pomocí rozptylových diagramů a charakterizován korelačními a regresními koeficienty. Současně sledována variační rozpětí I - hodnot čar analytického páru (Mn 2939,3 Å, Fe 2926,58 Å).

••••

M. Herkeřová, E. Plško, Ústav anorg. chemie SAV, Bratislava:
Posobenie chlóru pri spektrochemickom stanovení fluóru

Sledovalo sa spektrochemické stanovenie fluóru pomocou molekulového spektra CaF^+ . Doterajšie práce merali intenzitu príslušných pásov vzťahujú na intenzitu pozadia. Hľadali sme vhodný porovnávací prvok. V dôsledku rovnováh: $\text{CaF} + \text{Cl} = \text{CaCl} + \text{F}$ (1) a $\text{CaF} + \text{O} = \text{CaO} + \text{F}$ (2) sa vnútorný porovnávací prvok musí pridávať vo forme zlúčeniny, ktorá neobsahuje ani halogenidy ani kyslík. Zvolili sme tetrafenylboritan sodný.

V ďalšej časti práce sa sledovalo v akej forme je vhodnejšie pridávať ku vzorkám potrebný vápnik. Za tým účelom sme sledovali uvedené rovnováhy. Na základe toho, že rovnováha (2) je posunutá viac vpravo než rovnováha (1), je možné očakávať, že pri pridávaní CaCl_2 sa dostanú vyššie koncentrácie CaF , a teda i vyššie intenzity príslušných molekulových spektier než pri pridávaní vápnika vo forme kyslíkatých zlúčenín. Uvedený predpoklad sa overil experimentálne.

••••

Ve dnoch 22. a 23. dubna 1969 se konala v Domě kultury NHKG v Ostravě konference k 10. výročí založení Výzkumného a zkušebního ústavu NHKG. Této konference se v zastoupení ČSSS zúčastnil i věd. tajemník ČSSS dr. M. Horák CSc. Na konferenci byla řada přednášek věnována i problematice spektrální analýsy. Úplné texty přednášek jsou k dispozici v časopisu Hutnické listy (zvláštní čtvrté číslo 24. ročníku, zprávy z hutních laboratoří str. 299 - 313).

••••

8. pracovní schůze atomové sekce ČSSS se konala v Praze dne 30. dubna 1969. V celodenním zasedání pořádaném v přednáškovém sále Ústavu makromolekulární chemie ČSAV v Praze na Petřínách byly probírány základní pojmy analytické a kvantové mechaniky. Úvodní slovo k několikadílnému cyklu přednesl ing. L. Kučera. Vlastní přednášky převzali pracovníci Katedry fyziky Elektrotechnické fakulty ČVUT v Praze, ing. J. Lego, prom. fyz. J. Ferdinand a ing. F. Hanitz.

Základy teorie atomu a záření (klasická teorie)

V přednášce je podán přehled základních pojmů a metod řešení problémů, které souvisejí s teorií atomu. Nejprve je zaveden Lagrangeův a Hamiltonův formalismus a diskutovány důsledky, které odtud plynou. Dále je řešen a diskutován problém soustavy pohybujících se nabitých částic v dipolovém přiblížení. Jsou zavedeny elektromagnetické potenciály a odvozen vztah pro vyzařovanou energii. Konečně je diskutována problematika modelu atomu počínaje modelem Thomsonovým a Rutherfordovým. Dále je diskutován problém absolutně černého tělesa a vyozeny obecné důsledky pro kvantování energie. Na základě předdešlého je pak řešen a diskutován Bohrovův model atomu.

••••

MOLEKULOVÁ SEKCE

Dne 7. února 1969 uspořádala Československá spektroskopická společnost spolu s Československou akademií věd v budově ČSAV, Praha 2, Národní tř. č. 3 přednášku jednoho ze zakladatelů oboru infračervené spektroskopie a významného reprezentanta evropské skupiny molekulové spektroskopie, Sira H. W. Thompsona, St. John's College, Oxford na thema

Fyzikálně chemická měření s použitím infračervené spektroskopie. Přednáška byla věnována především možnostem využití interferenčních metod k měření a interpretaci spekter ve velmi vzdálené infračervené oblasti.



7. pracovní schůze molekulové sekce ČSSS se uskutečnila v rámci 1. Celoštatnej pracovnej porady o rádiospektroskopii, která se konala ve dnech 19. - 21. února 1969 na Katedře fyziky VŠT v Košicích, jejíž pracovníci mají také největší zásluhy o její přípravu a průběh.

Porady se zúčastnilo 77 pracovníků asi z 27 významných pracovišť, kde jsou jednotlivé obory rádiospektroskopie provozovány. Na poradě byly názorně vymezeny oblasti, které jsou v rámci metod rádiospektroskopie v ČSSR sledovány. Byla navázána řada velmi zajímavých kontaktů mezi účastníky a projednány možnosti spolupráce i zásady dalších schůzek zájemců.

Texty přednášek budou publikovány ve zvláštním sborníku s názvem "Rádiospektroskopía - Zborník referátov prvej Celoštatnej pracovnej porady o rádiospektroskopii v Košiciach vo dňoch 19. - 21. 2. 1969". Počet kusů sborníku je poměrně malý; zájemci o rádiospektroskopii, kteří se poradě nezúčastnili, by mohli získat informace o jeho získání u prof. ing. M. Rákoše, vedoucího Katedry fyziky VŠT v Košicích, Komenského park č. 2.

V průběhu porady byly předneseny tyto odborné referáty:
19. 2. 1969

Elektrónová paramagnetická rezonancia a feromagnetická rezonancia

(viedol Dr. Z. Frait, Dr.Sc.)

J. Ďurček, Katedra fyziky VŠD, Žilina

Akustická paramagnetická rezonancia (súborný referát)

F. Kubec, ÚRE ČSAV, Praha

Teplotní závislost konstanty hyperjemné vazby: Mn^{2+} v CdS

L. Kratěna, ÚRE ČSAV, Praha

Paramagnetická rezonance v monoklinických wolframanech

O. Bartko, M. Rákoš, Š. Šurka, Katedra fyziky VŠT, Košice,
Katedra exp. fyziky PFUK, Bratislava
Vplyv kryštalizačnej vody na EPR hydrátov $FeSO_4$.

J. Tiňo, Ústav polymerov SAV, Bratislava
Štúdium voľných radikálov metódou ESR

J. Loos, ÚFPL ČSAV, Praha
Feromagnetická rezonance a relaxace v izolátorech (souborný referát)

Z. Frait, D. Fraitová, FÚ ČSAV, Praha
K fenomenologickému popisu relaxačních procesů ve feromagnetické rezonanci

Z. Smetana, MF fakulta KU, Praha
K otázce původu šířky rezonanční čáry v systému $Mn_xFe_{3-x}O_4$ ($x < 1$)

20. 2. 1969

Jadrová magnetická rezonancia širokých čiar a dynamická polarizácia jadier (viedol Doc. Dr. J. Hennel a prof. Ing. M. Rákoš)

J. W. Hennel, odd. NMR IFJ PAN, Krakow
Práce v oboru NMR v IFJ PAN v Krakowe (souborný referát)

B. Sedlák, M. Rotter, MF fakulta KU, Praha
Studium NMR Ni^{61} v práškovém niklu

M. Rákoš, R. Šimo, Z. Varga, Katedra fyziky VŠT, Košice, Výzkumný ústav chem. vláken, Svit
Magnetické štúdium zmeny usporiadaného podílu v poly- ϵ -kaproamidových vláčkach

A. Tírpák, Katedra exp. fyziky Přírodovědecké fakulty UK, Bratislava
Magnetická relaxácia paramagnetických iónov v organických roztokoch

M. Odehnal, V. Petříček, ÚVJ ČSAV, Řež u Prahy
Dynamická polarizace jader (souborný referát)

J. Schraml, ÚTZCHT ČSAV, Praha

Intermolekulární nukleární Overhauserův efekt

Magnetická jadrová rezonancia vysokej rozlišovacej schopnosti
(viedol Ing. Z. Samek, C.Sc.)

Z. Samek, Ústav org. chemie a biochemie ČSAV, Praha

Magnetická jaderná rezonance vysoké rozlišovací schopnosti
(souborný referát)

B. Schneider, Ústav makromolekulární chemie ČSAV, Praha

Studium konformační struktury molekul pomocí NMR spekter vysokého rozlišení

D. Doskočilová, ÚMCH ČSAV, Praha

Studium polymerů pomocí NMR spekter vysokého rozlišení

J. Schraml, Ústav teor. zákl. chem. techniky ČSAV, Praha

NMR spektra některých 1, 1-dichlorcyklopropanů

Zvláště případy aplikací rádiospektroskopie (viedol Ing. Petříček C.Sc.)

V. Trkal, V. Bajgar, V. Vávra, ÚRE ČSAV, Praha

Čpakový maser pracující na inverzní čáře rotačního spektra
($J = 3, K = 2$) izotopického čpavku $^{15}\text{NH}_3$

V. Bajgar, V. Trkal, V. Vávra, ÚRE ČSAV, Praha

Vliv elektrického pole na kmitočet maseru

T. Zemčík, Ústav vlastností kovů ČSAV, Brno

Měření vnitřních polí na jádře Fe^{57} ve slitinách metodou jaderné gama-rezonance (Mössbauerova efektu)

Experimentálne zariadenia pre rádiospektroskopiu (viedol Prof. Ing. M. Rákoš, Ing. K. Švéda, C.Sc.)

K. Švéda, A. Sapík, Ústav přístr. techn. ČSAV, Brno, Tesla n. p. Brno

O perspektivách vývoje a výroby prístrojové techniky v ČSSR se zřetelom na rádiospektroskopii a niekoľik poznámek k přístrojové technice vícenásobných NMR rezonancí

J. Parýzek, VÚ org. syntéz, Pardubice

Aplikace počítače japonské fy Jeol typu JRA v NMR spektroskopii vysoké rozlišovací schopnosti

J. Jelínek, Ústav přístr. techniky ČSAV, Brno

Teplotní sonda NMR spektrometru vysokého rozlišení

M. Rákoš, Katedra

Závislost signálu NMR na zkruslení nízkofrekvenční modulácie

O. Chramosta, ÚPT ČSAV, Brno

Elektromagnety pro NMR a homogenizace jejich pole

J. Jelínek, ÚPT ČSAV, Brno

NMR spektroskopie vysoké rozlišovací schopnosti s použitím supravodivých magnetů



Na den 24. dubna 1969 byla svolána do Ústavu makromolekulární chemie ČSAV v Praze na Petřinách 8. pracovní schůze molekulové sekce ČSSS. Program schůze byl cele věnován problematice měření a interpretace mikrovlnných spekter.

K. Sarka, Ústav anorg. chemie SAV, Bratislava: Rotační spektra a struktura molekul

1. Theorie rotačních spekter

V aproximaci tuhého rotoru byl pro klasickou kinetickou energii rotace odvozen vztah

$$T_{\text{rot}} = \sum P_{\alpha}^2 / 2 I_{\alpha}$$

$$\alpha = x, y, z$$

kde P_{α} jsou kartézské složky celkového rotačního momentu molekuly a

I_{α} hlavní momenty setrvačnosti molekuly.

Tento výraz je převeden na kvantově-mechanický tvar zavede-

ním operátorů odpovídajících složkám rotačního momentu:

$$\hat{H}_{\text{rot}} = \sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}^2 / 2 I_{\alpha}$$

Řešením Schrödingerovy rovnice pro operátor \hat{H}_{rot} pak byly získány rotační energetické hladiny:

a) pro lineární molekulu

$$E/hc = B J (J + 1)$$

b) pro axiálně symetrické molekuly

$$E/hc = B J (J + 1) - (B - C) K^2 \quad (\text{zploštělý symetrický rotor})$$

c) $E/hc = B J (J + 1) + (A - B) K^2$ (protáhlý symetrický rotor)

c) pro asymetrické molekuly

$$E/hc = \frac{1}{2} (A + C) J (J + 1) + \frac{1}{2} (A - C) E (K),$$

kde $E (K)$ je tzv. redukovaná rotační energie. Ostatní symboly mají obvyklý význam. Pomocí výběrových pravidel byly pak odvozeny vlnočty přechodů mezi rotačními energetickými hladinami lineárních a axiálních symetrických molekul:

$$\tilde{\nu} = 2 B J (J + 1)$$

Uvedené výrazy pro energetické hladiny a vlnočty, platné v aproximaci tuhého rotoru byly dále zpřesněny zavedením konstant rotačně-vibrační interakce a konstant centrifugální distorze.

2. Určení struktury molekul z výsledků analýzy rotačních spekter

Byly diskutovány dvě metody:

a) tzv. "r_s-struktura", kde určení geometrie molekuly se provádí řešením momentových rovnic, tj.:

$$I_{\alpha\alpha} = \sum_i m_i (B_i^2 + \gamma_i^2)$$

$$I_{\alpha\beta} = 0 \sum_i m_i \alpha_i \beta_i$$

$$\sum_i m_i \alpha_i = 0 \quad (\alpha = x, y, z)$$

kde souřadnice atomů $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ považujeme za neznámé

b) tzv. "r_s-struktura", kde určení souřadnic nějakého atomu získáme řešením Kraitchmanových rovnic:

$$I_{\alpha\alpha}^e = I_{\alpha\alpha}^e + \mu (\beta_K^2 + \gamma_K^2); \quad I_{\alpha\beta}^e = \mu \alpha_K \beta_K$$

platných pro substituci k-tého atomu molekuly jeho izotopem. $I_{\alpha\alpha}^e, I_{\alpha\beta}^e$ jsou momenty setrvačnosti, resp. derivační momenty izotopicky substituované molekuly, $I_{\alpha\alpha}^e$ momenty setrvačnosti původní nesubstituované molekuly,

$$\mu = \frac{M \Delta m}{M + \Delta m},$$

M je hmota původní molekuly a Δm rozdíl hmot substituované a původní molekuly.

••••

J. Dušek, Fakulta elektrotechniky, Katedra šíření elektromagnetických vln, ČVUT Praha: Experimentální technika měření mikrovlnných spekter

Pro studium rotačních spekter molekul plynných látek se s výhodou užívá mikrovlnné absorpční spektroskopie v oboru vlnových délek 10 cm až 1 mm. V těchto pásmech byly už pro jiné technické účely dostatečně propracovány otázky šíření elektromagnetické energie a vyvinuty vhodné součástky pro generování, rozvod a měření mikrovlnné energie. To vše se dá s úspěchem použít pro realizaci zařízení pro mikrovlnnou absorpční spektroskopii.

Mezi nejdůležitější prvky spektroskopu patří zdroj záření, absorpční prostor a detekční systém. Jako zdroje monochromatického záření se nejčastěji užívá klystronových generátorů, které se dají snadno přeladovat a řídit; směrem k vyšším kmitočetům se kombinují s diodovými násobiči. Vedení elmg. vlny od zdroje k absorpčnímu prostoru a k detektoru je téměř výhradně provedeno pomocí vlnovodové techniky. Rovněž konstrukce absorpčních prostorů většinou dodržuje tvar kruhového neb obdélníkového vlnovodu. Tyto prostory, kde měřený plyn přichází do interakce s elmg. energií, je nutno po technické stránce volit jak s hlediska optimálních podmínek šíření elmg. vlny a vakuové

techniky, tak i s ohledem na agresivní účinky měřených plynů na stěny abs. prostoru. Konstrukční uspořádání abs. cel se mění i při užití různých metod měření a vyhodnocování abs. spekter. Detekce mikrovlnné energie se u nižších kmitočtů zajišťuje standartními diodovými detektory, pro vyšší kmitočty se užívá speciálních typů.

V současné době lze stav jednotlivých měřících metod dle náročnosti konstrukce i dosažené citlivosti rozdělit na tři základní typy: Metodu videodetekce, metodu heterodynní detekce a metodu molekulární modulace. Pro identifikaci čar s vyšší intenzitou absorpce lze užít první metody, která je i konstrukčně nejméně náročná. Její citlivost však dovoluje měřit čáry s abs. koeficientem pouze asi 10^{-6} cm^{-1} . Nejvíce užívanou metodou pro studium molekul s permanentním el. dipólovým momentem je Starkova metoda molekulární modulace, která krom vysoké citlivosti a rozlišovací schopnosti zaručuje odlišení čar absorpce od různých parazitních poklesů výkonu v měřícím zařízení. Rovněž velikost el. dipólového momentu se dá poměrně snadno stanovit. Obdobně pro plyny s permanentním magn. dipól. momentem lze užít Zeemanovy molekulární modulace.

Pro vyhodnocování kvantitativních analys plynů obsahuje spektrometr ještě pomocné elektronické prvky pro přesnou kalibraci kmitočtu, intenzity a šířky absorpční čáry. S ohledem na rozlišovací schopnost je nutno snížit na minimum všechny vlivy, které způsobují nežádané rozšíření absorpční čáry.

Současné nejcitlivější spektrometry dovolují měřit frekvenci s přesností až 10^{-8} , šířku absorpční čáry s přesností $\pm 2\%$, intenzitu s přesností $\pm 1\%$ a nejvyšší citlivost při identifikaci absorpčních čar je asi $1 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^{-1}$. Z těchto hodnot pak lze odvodit tolerance pro určování parametrů měřených molekul jako je např.: koncentrace plynů ve směsi, mezijaderné vzdálenosti a vazební úhly u některých molekul, dipólové momenty atd.

Mikrovlnný absorpční spektrometr lze s úspěchem použít pro četná měření v oboru fyziky molekul, analytické chemie i aplikované kvantové elektroniky.



ZPRÁVY

II. Seminář o aplikacích NMR-spektroskopie v organické chemii

Ve dnech 22. - 26. září 1969 pořádá Ústav organické chemie a biochemie ČSAV II. seminář o aplikacích NMR-spektroskopie v organické chemii. Seminář se uskuteční v přednáškovém sále Ústavu makromolekulární chemie ČSAV (Praha - Petřiny).

Předběžný program:

1. Dr. U. Dscheidegger (Varian AG, Zürich): "Der Overhauser Effekt und seine Anwendung in der organischen Chemie"
2. Dr. R. R. Ernst (ETH Zürich): "Noise decoupling"
3. Dr. R. R. Ernst (ETH Zürich): "Fourier-Transform-Spectroscopy"
4. Dr. H. Günther (Universität Köln): "Protonenresonanz ungesättigter Ringsysteme"
5. Prof. Dr. J. M. Lehn (Universität Strassbourg): "Anwendung der Kernresonanz zur Konformationsanalyse organischer Verbindungen"
6. Dr. W. Brügel (BASF Ludwigshafen): "Kernresonanz auf 220 MHz"
7. Prof. Dr. P. Diehl (Universität Basel): "Deuteriumresonanz"
8. Prof. Dr. P. Diehl (Universität Basel): "NMR-Spektren von nematischen Phasen"
9. Dr. B. Schneider (ÚMCH ČSAV Praha): "NMR-spektroskopie pevné fáze se zvýšeným rozlišením"

Kromě přednášek budou uspořádány diskuse k různým otázkám aplikací NMR-spektroskopie v organické chemii a chemii vůbec a rovněž je plánováno předvádění NMR-spektrometrů Varian T-60 a TESLA-NMR-80.



Pouze pro vnitřní potřebu. Vydává Československá spektroskopická společnost při ČSAV v Praze 7, Kostelní 42. Za ČSSS zodpovídá Dr. M. Horák CSc. Redakce Ing. F. Valeška. Redakční uzávěrka dne 4. července 1969.

Vytiskl Knihkoupce, n.p., závod 5, Praha 8, tř. Rudé armády 171