

BULLETIN

ČESKOSLOVENSKÉ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI PŘI ČSAV

ČÍSLO 8

KVĚTEN 1971

Zprávy ze schůzí Hlavního výboru a předsednictva ČSSS

Dr Ivan R u b e š k a CSc z Ústředního ústavu geologického v Praze byl pověřen plněním úkolů, které vyplývají z dřívější činnosti komise pro spektroskopii. Bylo dohodnuto, že se bude zúčastňovat schůzí Hlavního výboru a předsednictva ČSSS.

Byla ustavena Komise ČSSS pro přístroje a jejím předsedou ing. Jan J o k l z Ústavu makromolekulární chemie ČSAV v Praze. Těžiště práce této komise je ve zvyšování odborné kvalifikace spektrálních pracovníků, informování členů ČSSS o výrobních programech zejména čs. podniků, o přístrojových novinkách a zajímavostech. Zprávy bude komise a její zájmové skupiny publikovat v Bulletinu.

Na podzim t.r. se bude v Ostravě konat třídní akce Interlabu. Program jednoho půl dne obstará ČSSS.

Zpráva o IV. Československé spektroskopické konferenci

V dňoch 14.-18. septembra 1970 usporiadala Čs. spektroskopická spoločnosť v spolupráci s Domom techniky Žilina IV. Československú spektroskopickú konferenciu na Štrbskom Plese. Na konferencii sa zúčastnilo 210 účastníkov z ČSSR a 30 účastníkov zo zahraničia /MLR, NDR, PĽR, BĽR, NSR, Francúzsko, Rakúsko/.

Odborný program pozostával zo 67 prednášok, ktoré boli tematicky rozdelené do viacerých skupín a prednášalo sa v dvoch paralelných sekciiach. V prednáškach sa podávali najnovšie výsledky vedecko-výskumnej činnosti prakticky z celej oblasti spektroskopie. Okrem prednášok teoretického zamerania a prednášok, venovaných experimentálnej technike sa v rámci atómovej spektroskopie venovala väčšina prednášateľov spektrochemickej analýze ak vodivých tak i nevodivých materiálov a atómovej absorpčnej spektroskopii, pričom sa osobitná pozornosť sústredila i na využitie menej bežných a nových zdrojov budenia /duté katódy, vysekofrekvenčný výboj, lasery/, ako aj rentgenofluorescenčnej analýze. V rámci molekulevej spektroskopie bola väčšina príspevkov zameraná na využitie absorpcie v infračervenej i ultrafialovej oblasti spektra, na riešenie štruktúrnych i analytických problémov ak organických tak i anorganických látok. Okrem toho sa v niektorých prácach riešili problémy izotopových vplyvov a z hraničných oblastí rotačnej disperzie. Mimo vlastného programu sa zorganizoval i úspešný večerný seminár o využití laserovej techniky.

Organizačný výbor konferencie sa rozhodol nevydávať texty prednášok tlačou; resumé prednášok bola vytlačená vopred a bola rozdaná účastníkom konferencie pri jejím otvorení. Vzhľadom nato sa v Bulletinu nenachádzajú resumé a meno prednášajúcich.

Doc.ing. Eduard P l š k e DrSc,
predseda organizačného výboru

ATOMOVÁ SEKCE

Dne 19. listopadu 1970 sa konala v prednáškovom sále Ústavu makromolekulárnej chémie ČSAV v Praze 6 Na Petřínách 12. pracovná schůze Atomové sekce s tímto programom:

Jindřich L e g o, Katedra fyziky Elektrotechnické fakulty ČVUT Praha: Základy atómovej spektroskopie /dokončení/

V této části kurzu byly předneseny některé základní aplikace kvantové mechaniky, týkající se vyzařování elektromagnetických vln atomy. Byla odvozena obecná formule pro přechodovou pravděpodobnost mezi dvěma stavy atomu v dipolemém přiblížení.

Jindřich K l e i n m a n n, Ústav pro výzkum, výrobu a využití radioizotopů, Praha: Vysokofrekvenční výboj v argonu za atm. tlaku jako zdroj záření pro spektrální analýzu odparů roztoků.

V práci byly vyšetřovány některé analytické vlastnosti vysokofrekvenčního výboje, zejména vliv chemického složení vzorku na intenzitu spektrálních čar. Ukázalo se, že intenzita spektrálních čar nízkovýkonného vysokofrekvenčního výboje je do značné míry ovlivněna přítomností prvků s nízkým ionizačním potenciálem, sloučenin s vysokou disociační energií, chelatonů a pod. Experimentální výsledky byly v dobré shodě s thermodynamickými výpočty a s fyzikálním modelem vyšetřovaného výboje. V závěru byl proveden rozbor chyb. Vzhle-

dem k uvedeným vlastnostem lze nízkofrekvenční výboj doporučit pro analýzu jednoduchých, dobře definovaných vzorků, jako je velmi čistá voda, kyselina a pod.

Bedřich M o l d a n, předseda Zájmové skupiny plamenové spektroskopie: Informace o bibliografii a provádění rešerší v oboru plamenové spektroskopie.

Ve spolupráci s VŠCHT v Praze poskytuje Zájmová skupina plamenové spektroskopie placenou službu ve věci rešerší z tohoto oboru. Rešerše budou zpracovány na samočinném počítači; cena jedné rešerše je paušálně 200 Kčs + 1 Kčs za každý vyhledaný bibliografický údaj. Sazba je určena pro členy ČSSS, nečlenské organizace platí dvojnásobek.

Veškeré informace poskytuje a objednávky přijímá Laboratoř atomové absorpce katedry analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Praha 6 - Dejvice, Technická ulice č. 1905.

MOLEKULOVÁ SEKCE

Dne 19. listopadu 1970 se v přednáškovém sále Ústavu organické chemie a biochemie ČSAV, Praha 6 - Dejvice, Flemingovo nám. 2 konala 10. pracovní schůze Molekulové sekce ČSSS. Na program schůze, věnované Ramanově spektrometrii, byly zařazeny tyto přednášky:

Miloš P i s á r ě i k, Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava: Súdobý stav a aspekty Ramanovej spektrometrie.

V úvodnej časti prednášky sa podal stručný prehľad histórie vývoja techniky Ramanovej spektrometrie. V hlavnej časti prednášky boli diskutované požiadavky na parametre základných stavebných častí experimentálneho zariadenia na snímanie Ramanových spektier /zdroje, vzorková časť, monochromátor, detekcia, elektronika a registrácia/.

Na podklade kritického rozboru týchto parametrov sa hodnotil dosah možností použitia súdobej techniky Ramanovej spektrometrie na riešenie vibračnej štruktúry látok v rozličných skupenstvách. Poukázalo sa na trend vývoja experimentálnej techniky vzhľadom na súdobé možnosti prístrojovej techniky. Záver prednášky tvoril prehľad komerčných Ramanových spektrometrov s porovnaním ich technických parametrov.

Jan Š t o k r, Ústav makromolekulárnej chemie ČSAV, Praha: Měření Ramanových spekter při nízkých a vysokých teplotách.

V přednášce byly vysvětleny důvody, pro něž jsou studována Ramanova spektra sloučenin při nízkých teplotách a popsána experimentální technika těchto operací. Velkého zjednodušení bylo dosaženo použitím květ chlazených proudem temperovaného plynu. Stručně byla probrána i technika měření Ramanových spekter při teplotách vyšších než laboratorních.

VÝPOČTOVÁ TECHNIKA

Zájmová skupina analýzy kovových materiálů ve spolupráci s Výzkumným ústavem ČKD Praha uspořádala ve dnech 19.-23.dubna t.r. v Janských lázních Kurz základů statistiky pro aplikace ve spektrální analýze s tímto programem:

Statistické rozbory, rozdělení četností, statistické charakteristické polohy a měnlivosti.

Teoretické rozdělení: normální, binomické

Základní soubor a náhodný výběr; výběrové charakteristiky; rozdělení výběrových průměrů, chí - kvadrát rozdělení, t - rozdělení, F - rozdělení.

Bodové odhady parametrů, intervalové odhady parametrů, stanovení rozsahu výběru. Testy významnosti: měnlivosti dvou průměrů, rozdílnosti dvou rozptylů.

Závislosti funkční a statistické, párová a vícenásobná korelační analýza, párová a vícenásobná regresní analýza.

Diskriminační analýza.

Aplikace a příklady ze spektrální analýzy. Praktická cvičení a výpočty.

Účastníkům kurzu byla předem zaslána skripta s přednáškami a příklady.

PROGRAMY /pokračování/

3. Analýza kombinálních a harmonických frekvencí

Milan H o r á k, Ústav fyzikální chemie ČSAV, Praha 2, Máchova 7; Antonín V í t e k, Ústav organické chemie a biochemie ČSAV, Praha 6, Flemingovo nám. 2.

Program přiřazuje jednotlivým experimentálním frekvencím IČ a Ramanova spektra význam fundamentálních, prvních harmonických, binárních součtových nebo binárních rozdílových frekvencí. Multiplicita přiřazení se snižuje simultánním přiřazováním ve skupině podobných látek /na př. v sérii halogenderivátů/.

Ve vstupních datech se musí zadat úplný soubor fundamentálních frekvencí pro všechny zkoumané látky a dále soubor všech frekvencí. V programu se ze zadaných fundamentálních frekvencí vypočítávají harmonické a kombinální frekvence prostým součtem /dvojnásobkem/ a vyhledá se nejbližší experimentální frekvence. Existuje-li v zadaném intervalu taková frekvence u všech zkoumaných látek, vypočítávají se anharmonicitní příspěvky. Za vhodné přiřazení se pak počítá takové, u kterého je splněna podmínka "charakterističnosti" anharmonicit, t.j., že anharmonicitní příspěvky u všech látek jsou podobné.

Výsledkem výpočtu je tabulka sestupně seříděných experimentálních frekvencí s vyznačením přiřazení, symetrie kombinální, harmonické frekvence, anharmonicit, t.j., že anharmonicitní příspěvky u všech látek jsou podobné.

Program je vhodný pro analýzu souboru látek do 5 sloučenin, pro které je známo přiřazení fundamentálních frekvencí. Požadavkem je, aby byla splněna podmínka "charakterističnosti" anharmonicit. Nelze ho tedy použít pro simultánní přiřazování pro H a D deriváty.

Počítač: Elliott 503 /paměť 8 + 32k/
Jazyk: Elliott 503 Algol Mk.1
Medium: 8-stopá děrná páska, kód Elliott,
 sudá parita

4. Spectrograph 5

Antonín V í t e k, Ústav organické chemie a
 biochemie ČSAV, Praha 6, Flemingovo nám. 2

Program pro grafickou prezentaci IČ spektra,
 zadaného parametry jednotlivých pásů.

Ve vstupních datech se zadá počet pásů a in-
 terval vlnočtů, ve kterém má být teoretické spektrum nakres-
 leno. Dále se zadají jednotlivé pásy vlnočty svých maxim,
 svými pološířkami a absorbancí /nebo mol.ext.koeficientem/
 maxima pásu. /Tyto údaje mohou být získány z experimentálního
 spektra programy, publikovanými v Bulletinu č.7 pod čl a 2/.

Výsledkem výpočtu je obalová křivka, vzniklá
 superpozicí Lorentzových křivek jednotlivých pásů v daném
 rozsahu spektra. Program je ve dvou variantách: první kreslí
 křivku ve škále absorbance, druhý ve škále procent propust-
 nosti.

Hodí se pro vizuální porovnání experimentál-
 ního spektra a spektra popsaného parametry, získaná separací
 pásů.

Počítač: Gier /+ kreslič křivek Calcomp/

Jazyk: Gier Algol III

Medium: 8-stopá děrná páska, kód Gier
 /mod. IBM/, lichá parita.

Zprávy z komisí

Zpráva o zahájení činnosti Komise ČSSS pro názvosloví

Komise, pověřená vypracováním zásad spektroskopic-
 kého názvosloví, vznikla v letech 1962-63 z podnětu Kolegia
 fyzikální, anorganické a analytické chemie ČSAV a to jako pe-
 mocný orgán tehdejší Komise pro spektroskopii ČSAV. Přes
 úsilí mnoha členů této komise, vypracovat uvedený návrh, prá-
 ce z různých příčin uvázla na mrtvém bodě.

Zřízením Čs.spektroskopické společnosti při ČSAV
 přešla odpovědnost Komise pro spektroskopii na Hlavní výbor
 společnosti. Proto se vedení ČSSS rozhodlo obnovit činnost
 Komise pro názvosloví. V dohledné době lze úkoly této Komise
 formulovat takto:

Jako kulturní stát, pedilející se na mezinárodní
 organizaci normotvorné práce, jsme povinni respektovat usne-
 sení nadřazených mezinárodních komisí, vytvořených organiza-
 cí IUPAC a IUPAP. V jejich rámci pracuje na normalizaci náz-
 vosloví a symboliky již delší dobu Komise pro spektrometric-
 ké a jiné optické metody pod vedením prof.H.Kaisera. Členy
 této komise jsou dále: prof. Fassel, prof. Alkemade, dr Men-
 zies - tedy vesměs známé, mezinárodně uznávané kapacity.
 Výsledkem práce komise je několikrát projednávaný a přepra-
 covaný návrh základních pojmů a definic z oboru emisní spek-
 trální analýzy, předložený a schválený jako prozatímní na
 XXV. konferenci IUPAC v Cortině d'Ampezzo v roce 1969. Tento
 návrh byl ještě doplněn a upraven podle došlých připomínek
 na schůzi komise v Dortmundu loňského roku. Tak byl přípra-
 ven návrh, který bude velmi pravděpodobně schválen jako defi-
 nitivní na letošní XXVI. konferenci IUPAC ve Washingtonu.

Komise ČSSS pro názvosloví seznámí členy ČSSS s
 překladem tohoto návrhu v příštích číslech Bulletinu. Tak se
 v tomto roce dostane naší veřejnosti do rukou norma, která -
 bude-li bez námitek přijata - by se měla stát jednotnou směr-
 nicí v oblasti názvosloví.

Potíž je samozřejmě v tom, že tato norma obsahuje jen nevelký počet pojmů, navíc pouze z jedné oblasti spektroskopie. Komise ČSSS pro názvosloví vypracuje v tomto roce plán, jak se v dohledné době vypořádat i s tímto dalším a velmi složitým problémem.

Doc. Dr. Ing. Bohumil P o l e j CSc,
předseda Komise ČSSS pro názvosloví

Zpráva o návrhu úkolů Komise ČSSS pro výchovu a školství

Při jednáních, vedených členy PHV ČSSS s předsedou Komise Zbyněkem Ksandreem byly prozatímně stanoveny její úkoly. Soustředí se na tuto činnost:

1. Zavedení evidence o přednáškách /povinných i doporučených/ na vysokých školách v ČSSR ze všech spektroskopických oborů. Výsledky této práce budou periodicky /před zahájením semestru/ předkládány členům ČSSS v Bulletinu. Podobně bude vedena evidence o příležitostných cyklech přednášek, o seminárních a praktických cvičeních, postgraduálních kurzech, pořádaných vysokými školami, výzkumnými ústavu, případně ČSSS. Evidovány budou i zahraniční akce.

2. Získání přehledu o školících pracovištích a školitelích, o jejich kapacitě a pod.

3. Koordinování činnosti zájmových skupin ČSSS a případné odstraňování duplicity při pořádání kurzů, školení a pod.

4. Vedení evidence o stávajících a nových skriptech přednášek ze spektroskopických oborů.

5. Zajišťování recenzí skript a uveřejňování těchto recenzí v Bulletinu, spolupráce s časopisy Collection a Chemické listy.

Doc. Dr. Ing. Zbyněk K s a n d r CSc,
předseda Komise ČSSS pro výchovu a školství

ZPRÁVY

Z iniciativy Zájmové skupiny lokální spektrální analýzy, která se sešla 10. března t.r. na 1. schůzce v Ústředním kulturním domě dopravy a spojů na Vinohradech, byla ustanovena Zájmová skupina pro lokální spektrální analýzu s použitím laserů. Jejím prozatímním vedením byla pověřena ing. V. J á n o š í k o v á z Výzkumného ústavu NHKG v Ostravě.

O vznik této zájmové skupiny projevíli zájem pracovníci ze šestnácti pracovišť, na nichž se pracuje s laserem.

R e c e n s e :

Základy optické spektroskopie

Učební texty vysokých škol byly záslužným způsobem obohaceny vydáním skripta "Základy optické spektroskopie". Dílo vzniklo spoluprací a péčí šesti autorů, vynikajících odborníků ve spektroskopické a spektrografické analýze. Někteří z nich stáli již před dvaceti lety u kolébky "Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze" a podíleli se aktivně na rozvoji tohoto sdružení, které se teprve v poslední době změnilo v "Československou spektroskopickou společnost při ČSAV". Již tato skutečnost je zárukou vysoké úrovně skripta, které jistě splní svůj účel jak u posluchačů elektrotechnických fakult, tak i u pracovníků ve spektrálních laboratořích

průmyslových závodů a výzkumných ústavů.

Probíraná látka skripta je rozdělena do tří částí přibližně stejného rozsahu. První dvě části tvoří samostatné kapitoly "Teoreticko-experimentální základy vizuální spektroskopie" a "Praktické využití stiloskopické analýzy", třetí část obsahuje tabulky spektrálních čar a jejich vlnových délek.

Prvních dvacet stránek první kapitoly je věnováno teoretickému úvodu, který je pro poslání skripta postačující. Zbývající část první kapitoly je věnována budícím zdrojům. U elektrických budících zdrojů jsou uvedena schemata zapojení a jsou také popsány jednotlivé funkční prvky uvedených zařízení. Čtenář se tu seznámí s nejdůležitějšími zařízeními a běžně používanými zdroji, s nimiž přichází jí do styku pracovníci dobře vybavených a zařízených spektrografických laboratorů.

V závěru první kapitoly jsou popsány i optické systémy stiloskopů, uzpůsobené pro pozorování spekter dvou různých zdrojů.

Druhá kapitola o celkovém počtu 74 stran začíná popisem stiloskopických přístrojů, v současné době běžně vyráběných a dostupných u výrobců u nás, v NDR, SSSR a v NSR. Je v ní popsáno i seřízení přístrojů, jejich obsluha a postup práce při provádění stiloskopické analýzy. Tato část je pro čtenáře a analytika zvláště cenná. Důležité poznatky a pokyny, plynoucí z dokonalé znalosti všech zde popisovaných přístrojů a z dlouholeté praxe všech autorů skripta jsou neocenitelnou pomůckou každému, kdo se stiloskopickou analýzou zabývá.

V další části této kapitoly jsou důležité etapy analytických postupů, jako např. způsob orientace ve viditelné části spektra, vizuální vyhodnocování spekter, měření vlnových délek, meze důkazu a dokazatelnosti prvků a vyhodnocení spekter při kvalitativní, polokvalitativní a kvantitativní stiloskopické analýze.

Třetí část skripta /65 stran/ vyplňují tabulky. Především jsou zde uvedeny analytické spektrální čáry jednotlivých prvků, vlnové délky spektrálních čar železa a mědi ve viditelné části spektra a dokazatelnost nejdůležitějších analytických čar v této oblasti. Tato tabulární část skripta je zakončena tabulkami homologických párů spektrálních čar, doporučených pro stiloskopickou analýzu nejdůležitějších kovových materiálů, t.j. slitin na bázi železa, na bázi mědi a na bázi hliníku.

Závěrem lze říci, že skriptum je cennou učebnicí a pomůckou pro posluchače elektrotechnických fakult i pro pracovníky spektrálních laboratorů. Je i vítaným přínosem k ne příliš početné řadě našich publikací z oboru spektroskopie.

M. S p á l e n k a,
Výzkumný ústav kovů,
Panenské Břežany

E.F.Mooney: An Introduction to 19F NMR Spectroscopy. Heyden & Son Ltd, London, 1970, 95 stran.

Tato knížka má být úvodem k interpretaci spekter fluorové magnetické resonance a k jejich aplikacím v organické a částečně i v anorganické chemii. Předpokládá znalost principů jaderné magnetické resonance vysokého rozlišení a jistou praxi v interpretaci NMR spekter protonů. Celkem 65 stran textu, z něhož navíc zhruba polovinu zabírá 29 obrázků, je rozděleno do šesti kapitel. V prvé jsou probrány otázky škály a referenčních sloučenin, rozsahu chemických posunů ¹⁹F spekter, a projevy přítomnosti fluoru v NMR spektrech protonů. V dalších jsou probírána spektra sloučenin fluoroaromatických, perfluoroalicyklických, fluoroalifatických, fluoro-

vané heterocykly a anorganické sloučeniny fluoru.

Všechny diskutované problémy jsou demonstrovány na originálních spektrech a výklad má formu srovnání s interpretací analogických spekter protonů. Na textovou část navazuje sbírka 44 spekter různých sloučenin fluoru, registrovaných na přístroji Perkin-Elmer R 10 při 56,4 MHz a 64 literárních citací.

Je zřejmé, že při zmíněném rozsahu textu může být výklad jen informativní a na knížku je proto třeba pohlížet spíše jako na mírně komentovanou malou sbírku /známého "sadtlerovského" typu/ NMR sloučenin fluoru.

Danica D o s k o č i l o v á,
Ústav makromolekulární chemie ČSAV,
Praha



Pouze pro vnitřní potřebu. Vydává Československá spektroskopická společnost při ČSAV v Praze 9, Na Harfě 7. Za ČSSS zodpovídá Dr. M.Horák CSc. Redakce Ing. F.Valeška. Redakční uzávěrka dne 7.dubna 1971.

Vytiskla Státní tiskárna, n.p., závod 5, Praha 8,
Tr. Rudé armády 171.