

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

<b>Riešiteľ:</b> Doc. Dr. Štefan Matejčík, DrSc	<b>Evidenčné číslo projektu:</b> APVT-20-007504
<b>Názov projektu:</b> Komplexné štúdium ionizačných reakcií elektrónov s molekulami technologického a biologického významu a ich úloha vo vysokotlakých elektrických výbojoch.	
<b>Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:</b>	Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského Bratislava
<b>Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):</b>	Institut f. Ionenphysik, Universität Innsbruck, Rakúsko
	Open University, Milton Keynes, UK
	Freie Universität, Berlin, SRN
<b>Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:</b>	-
	-
	-
<b>Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované):</b>  <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	D. Huber, M. Beikircher, S. Denifl, F. Zappa, S. Matejčík, A. Bacher, V. Grill, T. D. Märk and P. Scheier, High resolution dissociative electron attachment to gasphase adenine, J. Chem. Phys., 125 (2006) 084304
	Papp, P, Author Papp Peter Papp, Peter , Urban, J, S. Matejčík, O. Ingilfsson, Dissociative electron attachment to gas phase valine: A combined experimental and theoretical study, Journal of Chemical Physics 125 (2006)
	S. Ptasinska, S. Denifl, P. Candori, S. Matejčík, P. Scheier, T.D. Märk, Dissociative electron attachment to gas phase alanine, Chem. Phys. Lett., 403 (2005) 107-112
	I. Martin, T. Skalicky, J. Langer, H. Abdoul-Carime, G. Karwasz, E. Illenberger, M. Stano, S. Matejčík, Low energy electron driven reactions in single formic acid molecules (HCOOH) and their homogeneous clusters, Phys . Chem. Chem. Phys . , 7 (2005) 2212 -2216
	N.L. Asfandiarov, S.A. Pshenichnyuk, V.G. Lukin, I.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, Š. Matejčík, Temporary anion states and dissociative electron attachment to nitrobenzene derivatives, International Journal of Mass Spectrometry 264 (2007) 22–37
<b>V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu:</b>	Uplatnenie výsledkov v oblasti plazmových technológií, optimalizácie plazmových procesov, v oblasti termonukleárnej fúzie, radiačných poškodení organizmov a buniek, detekcia látok

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.

Podpis riešiteľa: .....

Dátum: ..20.1.2007.....

## Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: APVT-20-007504

### Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

V oblasti experimentálneho štúdia reakcií záchytu elektrónov na molekuly sme sa venovali výskumu molekúl biologického významu (leucín, isoleucín, alanín, valín) a molekulami technologického významu (1Cl-,1Br-propán, 1Cl-,2Br-propán, 1Cl-,3Br-propán, HMDSO, ) pre ktoré sme identifikovali produkty reakcií, zmerali parciálne účinné prierezy pre vznik uvedených produktov, určovali prahové energie produktov a študovali vplyv teploty plynu na kinetiku uvedených reakcií.

V oblasti experimentálneho štúdia reakcií ionizácie molekúl nárazom elektrónov na molekuly sme študovali molekuly biologického významu. Pre tieto molekuly (leucín, isoleucín, alanín, valín, alfa- a beta- pinén, tetra-hydro-furfuryl alkohol) sme zmerali hmotnostné spektrá molekúl, určovali ionizačné energie molekúl a prahové energie jednotlivých iónov. V prípade molekúl významných z hľadiska termionizácie (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>2</sub>D<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, CD<sub>4</sub>) sme určovali účinné prierezy pre ionizáciu nárazom elektrónov, určili ionizačné energie a prahové energie produktov, určili vplyv teploty na uvedené reakcie.

Interpretácia experimentov bola uskutočnená na báze kvantovo-mechanických výpočtov štruktúr, energií študovaných molekúl, iónov a neutrálnych fragmentov metódami kvantovej chémie (G3 MP2, CBSQ, BLIP ...), pomocou ktorých sme identifikovali produkty reakcií na báze ich chemickej stability a reakčnej entalpie.

V rámci projektu sa nám podarilo skonštruovať iónový pohyblivostný spektrometer (IMS) zameraný na štúdium formovania iónov vo vysokotlakých výbojoch – predovšetkým v korónovom výboji a štúdiu ión-molekulových reakcií pri atmosférickom tlaku. S využitím IMS spektrometra sme študovali tvorbu záporných iónov v zápornom korónovom výboji pri atmosférickom tlaku v zmesiach N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>, v CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O a vplyv vody na uvedený vplyv výboja.

Metódami infračervenej a UV/VIS optickej spektroskopie sme študovali parametre kladného a záporného korónového výboja a formovanie ozónu v plynch CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O a zmesiach plynov O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O a vo vzduchu. Skúmali sme vplyv materiálov, polaritu a zloženia zmesí na parametre výbojov a tvorbu produktov. Okrem optickej spektroskopie sme metódou hmotnostnej spektroskopie študovali produkty korónového výboja vo vzduchu..

### Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

In the framework of the project we have studied the dissociative electron attachment (DEA) reactions to the biologically relevant molecules (leucine, isoleucine, alanine, valine) and to the molecules of the technological relevance (1Cl-,1Br-propán, 1Cl-,2Br-propán, 1Cl-,3Br-propán, HMDSO,). We have measured the partial cross sections for the DEA to the above mentioned molecules, the appearance energies of the ions and the dependence of the cross sections on the gas temperature. In the field of the electron impact ionisation reactions (EII) we have studied the molecules of the biological relevance (leucín, isoleucín, alanine, valine, alfa- a beta- pinene, tetra-hydro-furfuryl alcohol). For these molecules we have measured the mass spectra, the ionisation energies of the molecules and the appearance energies of the ions. In the case of molecules relevant to the thermonuclear fusion plasma (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>2</sub>D<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, CD<sub>4</sub>) we have measured the ionisation energies, appearance energies of the molecules as a function of the gas temperature and also the partial cross sections for the EII as a function of the gas temperature. The experiments were supported in the interpretation of the results by high level quantum chemical calculations of the structure and energetics of the molecules and their ionic and neutral products (G3 MP2, CBSQ, BLIP ...). On the basis of the calculations we have identified the products of the EII reaction on the basis of the reaction enthalpies.

In the framework of the project we have built a Ion Mobility Spectrometer (IMS) designated to the measurements of the ionic spectra of the high pressure discharges and the studies of the ion-molecules reactions at atmospheric pressure. Using this technique we have measured the products of the negative corona discharge in N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> mixtures and admixtures of CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O.

Using the methods of the IR and UV/VIS optical spectroscopy we have studied the parameters of the positive and negative corona discharge and the formation of the ozone in the gases CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O and the gas mixtures O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>O and small admixtures H<sub>2</sub>O. We have studied the effect of the electrode materials, polarities and the mixture coefficient on the discharge parameters and the formation of the products. Additionally, we have carried out the mass spectroscopic analysis of the negative corona discharge in air.

Podpis riešiteľa: .....