

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0365-07**

Interakcie elektrónov s molekulami relevantnými pre termonukleárnu fúziu a technologickú plazmu

Zodpovedný riešiteľ **Prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc**

Príjemca **Fakulta matematiky, fyzika a informatiky UK**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Katedra Experimentálnej Fyziky, FMFI UK
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Institute of Ion Physics, University Innsbruck, Austria
2. Open University Milton Keynes, UK
3. University of Iceland, Reykjavík, Island

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. . Milosavljevic AR, Kocisek J, Papp P, Kubala D, Marinkovic BP, Mach P, Urban J, Matejčík S, Electron impact ionization of furanose alcohols, THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, Issue 132 (2010), 104308
2. Kocisek J, Papp P, Mach P, Vasilev YV, Deinzer ML, Matejčík S, Resonance electron capture by serine, J. PHYS. CHEM., Issue 114 (2010), 1677-1683
3. . Mahmoodi-Darian M, Tian SX, Denifl S, et al., Temperature dependence of dissociative electron attachment to 1-bromo-2-chlorobenzene and 1-bromo-3-chlorobenzene, INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 293, Issue 1-3 (2010), 51-55
4. 5. I. Ipolyi, E. Burean, T. Hamann, M. Cingel, S. Matejčík, P. Swiderek, Constanze

Koenig-Lehmann, Janina Kopyra, Iwona Dabkowsk, Jaroslav Kočíšek, Eugen Illenberger , Low-energy electron-induced chemistry of condensed-phase hexamethyldisiloxane: Initiating dissociative process and subsequent reactions, International Journal of Mass Spectrometry 282 (2009) 133, doi:10.1016/j.ijms.2009.02.020

5. S Engmann, M Stano, Š Matejčík, O Ingólfsson, The role of dissociative electron attachment in focused electron beam processing – a case study on cobalt tricarbonyl nitrosyl, prijatý do časopisu Angewandte Chemie - International edition

Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt mal charakter základného výskumu. V rámci projektu sme študovali interakcie elektrónov s molekulami technologického, biologického významu. Výsledky majú aplikačný výstup v oblastiach plazmových technológií a nanotechnológií, pretože poznatky získané o účinných prierezoch reakcií, energetických bilanciách reakcií a produktoch reakcií študovaných molekúl sú významné pre technológie CVD, FIB a FEB. V rámci projektu sme aplikovali niektoré postupy na skúmanie procesov prebiehajúcich v atmosférických výbojoch v zmesiach CH₄-N₂. Časť študovaných reakcií má význam i pre oblasť optickej emisnej diagnostiky plazmy, elektrických výbojov a TOKAMAKov. Výsledky získané v oblasti interakcie elektrónov s molekulami biologického významu sú zamerané na pochopenie procesov prebiehajúcich v pri interakcii ionizačného žiarenia so živými organizmami.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

V rámci projektu sme študovali reakcie záchytu elektrónov reakcie ionizácie nárazom elektrónov a disociačné ionizačné reakcie na molekuly technologického významu Co(CO)₃NO, W(CO)₆, MeCpPtMe₃, Pd(hfac)₂, TVS, DMPS, TCVS, 1-bromo-2-chlorobenzene and 1-bromo-3-chlorobenzene a molekuly biologického významu serín, leucín, isoleucín, valín a furanózny alkohol. Pre uvedené molekuly sme určili ionizačné účinné prierezy, ionizačné energie, prahové energie reakcií a produkty reakcií.

Interpretácia experimentálnych výsledkov bola na báze metód kvantovej chémie, pomocou ktorých sme určovali iónové a neutrálne produkty reakcií. V rámci projektu sa podarilo implementovať BEB metódu na výpočet totálnych ionizačných účinných prierezov na molekuly CH₄ a C₂H₄.

Jedným s cieľov projektu bola konštrukcia novej aparatury na skúmanie excitačných a disociačných reakcií elektrónov s molekulami - EIFA. Zariadenie bolo skonštruované testované a dosiahlo požadované parametre. Zariadenie sme použili na skúmanie excitačných reakcií elektrónov s molekulami N₂ a CH₄ (2. Pozitívny systém N₂, 1. Negatívny systém N₂ a disociatívnu excitáciu CH₄).

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

Within the project we have studied the electron attachment, electron impact ionisation and dissociative ionisation reactions to molecules of technological relevance Co(CO)₃NO, W(CO)₆, MeCpPtMe₃, Pd(hfac)₂, TVS, DMPS, TCVS, 1-bromo-2-chlorobenzene and 1-bromo-3-chlorobenzene and molecules of biological relevance serín, leucín, isoleucín, valín a furanose alcohol. We have stimated the cross sections of the reactions, the ionisation energies, appearance energies of the ions and the ionic and neutral products of the reactions.

The interpretations of the experiments was on the basis of standard methods of the quantum chemistry. These methods have been applied to interpret the products of the reactions. We have implemented the Binary Encouter Bethe method to calculate total cross sections for CH₄ and C₂H₄.

One of the aims of the projects was the construction of a new apparatus for for electron electron impact excitation and dissociation of molecules - EIFA. This task was sucessfully

accomplish and the new apparatus has been tested. and achieved expected parameters. We applied the apparatus to study excitation and dissociation cross sections for N₂ and CH₄ (2nd Positive System N₂, 1st Negative System N₂ a dissociative excitation to CH₄).

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc

V Bratislave 23. 06. 2011

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof. RNDr. Jozef Masaryk, DrSc.

V Bratislave 23. 06. 2011

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu