

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0580****Interakcie elektrónov a iónov s molekulami a ich aplikácie v oblasti analytických a diagnostických metód**Zodpovedný riešiteľ **prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc.**Príjemca **Univerzita Komenského v Bratislave - Fakulta matematiky, fyziky a informatiky**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Katedra experimentálnej fyziky, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, Bratislava

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

University Bremen, Nemecko.

Auburn University, USA.

Ústav molekúl a kryštálov, Ruská akadémia vied, Ufa, Ruská federácia.

National Research Nuclear University, MEPhI, Moskva, Ruská federácia.

Institute of Physics, Belehrad, Srbsko.

Ruská akadémia vied, Moskva, Ruská federácia.

Univerzita Innsbruck, Rakúsko.

Kent University, Veľká Británia

Vysoké učení technické Brno, Česká republika.

Osaka University, Japonsko.

Ústav fyzikálnej chémie J. Heyrovského, ČAV, Praha, Česká republika.

Nicolaos Copernicus University, Toruň, Poľsko.

Siedlce University of Natural Sciences and Humanities, Poľsko.

The Open University, Veľká Británia.

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

-

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

Klas, M; Moravsky, L; Matejčík, S; Zahoran, M; Martisovits, V; Radjenovic, B; Radmilovic-Radjenovic, M, The breakdown voltage characteristics of compressed ambient air microdischarges from direct current to 10.2 MHz, PLASMA SOURCES SCIENCE & TECHNOLOGY, 26 (2017) 055023, 10.1088/1361-6595/aa674e

Samel, M; Stano, M; Zahoran, M; Ries, M; Matejčík, S; Experimental characterisation of atmospheric pressure electron gun, INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 39 (2019) 34-41, 10.1016/j.ijms.2019.01.012

Durian, M; Samel, M; Matejčík, S; Step-scan Michelson Fourier-transform spectrometer for

optical emission spectroscopy in UV-VIS spectral range, REVIEW OF SCIENTIFIC INSTRUMENTS, 91 (2020) 033102, 10.1063/1.5119206
Allan, M; Lacko, M; Papp, P; Matejcik, S; Zlatař, M; Fabrikant, I; Kocisek, J; Fedor, J; Dissociative electron attachment and electronic excitation in Fe(CO)₅, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 20 (2018) 11692-11701, 10.1039/c8cp01387j
Lacko, M; Papp, P; Matejcik, S; Dissociation of dicyclohexyl phthalate molecule induced by low-energy electron impact, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 148 (2018) 214305, 10.1063/1.5026406
Orszagh, J; Danko, M; Cechvala, P; Matejcik, S; Dissociative Excitation of Acetylene Induced by Electron Impact: Excitation-emission Cross-sections, ASTROPHYSICAL JOURNAL 841 (2017) 17, 10.3847/1538-4357/aa6e54
Michalczuk, B; Moravsky, L; Papp, P; Mach, P; Sabo, M; Matejcik, S, Isomer and conformer selective atmospheric pressure chemical ionisation of dimethyl phthalate; PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 21 (2019) 13679-13685, 10.1039/c9cp02069a
Michalczuk, B; Sabo, M; Jatzova, K; Moravsky, L; Gregorova, M; Matejcik, S; Fast quantification of whisky lactone in oak wood by ion mobility spectrometer, TALANTA 209 (2020) 120567, 10.1016/j.talanta.2019.120567

Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt bol zameraný na výskum elektrónových a iónových procesov vo výbojoch a mikrovýbojoch pri vyšších tlakoch. Výskum mal v prevažnej miere charakter základného výskumu, ale výsledky projektu majú silný potenciál využitia v oblasti vývoja nových analytických metód, vývoja nových plazmových technológií (depozície), nanotechnológií (focused electron beam induced deposition - FEBID) a využitia získaných poznatkov v oblastiach ako sú fyzika plazmy a astrofyzika.

V rámci projektu sme študovali elektrónové a iónové procesy, ktoré viedli k objasneniu mechanizmov ionizačných procesov v ionizačných zdrojoch hmotnostných spektrometrov (MS) a iónových pohyblivostných spektrometrov (IMS), ionizačných a disociačných reakcií elektrónov s molekulami pre oblasť plazmových depozícií a pre oblasť nanotechnológií FEBID. Viaceré výsledky štúdia excitačných reakcií molekúl s elektrónmi sú priamo aplikované pri analýze astrofyzikálnych dát z misie ESA/NASA Rosetta z rámci novovytvorenej spolupráce s viacerými univerzitami z USA.

Vyvinuli sme zdroj elektrónového zväzku pri atmosférickom tlaku, získali jeho detailné charakteristiky a overili jeho funkčnosť ako zdroja iónov pre IMS a fotónov pre fluorescenčné merania. Toto inovatívne zariadenie umožňuje štúdium interakcie elektrónov s plynmi pri vysokých tlakoch ako i s kvapalinami a tuhými látkami bez potreby manipulovať so študovanými látkami vo vákuu. Úspešne sme vyvinuli a otestovali Fourier Transform optický spektrometer pre oblasť UV-VIS na báze krokového nano-posuvu, ktorý má vysoký potenciál v oblasti vysokocitlivých spektrometrických meraní napríklad v astronómii a vo fyzikálnom výskume.

V rámci projektu sme preukázali vysokú citlivosť IMS v oblasti detekcie ftalátov a schopnosť rozlišovať izoméry ftalátov. Ftaláty patria medzi látky s negatívnym vplyvom na zdravie a na životné prostredie. Skúmali sme využitie IMS v oblasti detekcie látok vo výrobných technológiách (detekcia whisky laktónu, monitoring plazmovej dekompozície ftalátov, detekcia nečistôt v rope).

Výskumné aktivity v oblasti výbojov a mikrovýbojov pri atmosférickom tlaku boli zamerané predovšetkým na základný výskum. Získané poznatky sme sa snažili aplikovať v oblasti použitia plazmových zdrojov v oblasti biomedicíny, v poľnohospodárstve a v oblasti technológií opracovania povrchov.

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

Štúdium interakcií elektrónov s molekulami bolo motivované aplikáciami v oblasti analytických metód (ftaláty), plazmových technológií (cyklo-propyl amín - CPA), nanotechnológií (CoNO(CO)₃, Fe(CO)₅), ako i výskumom v oblasti astrofyziky a fyziky plazmy (O₂, H₂O, C₂H₂, pyridin). Výsledkom skúmania sú účinné prierezy reakcií, hmotnostné spektrá molekúl a optické emisné UV-VIS spektrá molekúl. Ďalej sme určili prahové energie a produkty ionizačných, excitačných a disociačných reakcií. Experimentálne výsledky boli doplnené kvantovo-chemickými výpočtami produktov reakcií,

ktoré viedli k identifikácii produktov a ich štruktúr. V rámci projektu sme vyvinuli zdroj elektrónového zväzku pri atmosférickom tlaku (elektrónové delo - EG). Funkčnosť EG bola overená vo forme ionizačného zdroja pre iónovú pohyblivostnú spektrometriu (IMS) a fluorescenčného zdroja pre optickú emisnú spektrometriu. Vyvinuli sme optický Fourier Transform spektrometer pre UV-VIS oblasť na báze krokového nano-posúvača a overili jeho funkčnosť v oblasti elektrónmi indukovanej fluorescence.

V oblasti štúdia ión-molekulových procesov pomocou IMS a hmotnostnej spektrometrie (MS) sme študovali mechanizmus chemickej ionizácie pri atmosférickom tlaku (APCI) pre ftaláty, preukázali schopnosť IMS separovať izoméry dimetyl ftalátu (DMP) a schopnosť efektívne detekovať ftaláty (DMP, diethyl ftalát - DEP, dipropyl ftalát -DPP, dibutyl ftalát - DBP ako aj ich izoméry). Preskúmali sme vplyv aditív na APCI metódou IMS-MS, ako aj mechanizmus APCI pre chlórované uhľovodíky a thioly. Preskúmali sme vhodnosť IMS techniky pre diagnostiku atmosférických výbojov.

V oblasti mikrovýbojov sme skúmali mechanizmus elektrického prierazu v O₂ v širokom rozsahu frekvencií budenia (DC - RF), podobný výskum sme vykonali i pre stlačený vzduch. Vplyv emisie elektrónov pod vplyvom silného elektrického poľa bol študovaný vo vákuu pre rôzne typy elektród. Plazma generovaná mikrovýbojmi bola aplikovaná v oblasti biomedicínskeho výskumu a v oblasti opracovávaní semien pre oblasť agrotechniky.

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

The studies of the interactions of electrons with the molecules were mainly motivated by the applications in the field of analytical methods (phthalates), plasma technologies (cyclopropyl amine - CPA), nanotechnology (CoNO(CO)₃, Fe(CO)₅), as well as by research in the fields of astrophysics and plasma physics (O₂, H₂O, C₂H₂, pyridine). The main results of the research are the effective cross-sections of the reactions, the mass spectra of molecules, and the emission spectra of molecules in UV-VIS. In addition, we have determined the thresholds and products of ionization, excitation, and dissociation reactions. The experimental results were supplemented by the quantum-chemical calculations of the reaction products, which led to identification of the products and their structures. As part of the project, we have developed an electron beam source at atmospheric pressure (electron gun - EG). The functionality of EG was verified in the form of an ionization source for ion mobility spectrometry (IMS) and a fluorescent source for optical emission spectrometry. We have developed an optical Fourier Transform step scan spectrometer for the UV-VIS region based on a nano-slider and verified its functionality in the field of electron-induced fluorescence.

In the field of ion-molecule interactions using IMS and the mass spectrometry (MS), we have studied the mechanism of atmospheric pressure chemical ionization (APCI) for phthalates, demonstrated the ability of IMS to separate isomers of dimethyl phthalate (DMP) and the ability to effectively detect various phthalates (DMP, diethyl phthalate - DEP, dipropyl phthalate - DPP, dibutyl phthalate - DBP as well as their isomers). We have investigated the effect of additives on APCI by IMS-MS, as well as the APCI mechanism for chlorinated hydrocarbons and thiols. We have investigated the suitability of IMS technology for the diagnostics of atmospheric pressure discharges – detection of neutral products.

In the field of micro-discharges, we have investigated the mechanism of electrical breakdown in O₂ in a wide range of excitation frequencies (DC - RF) and we have performed similar research for compressed air as well. The effect of field electron emission under the influence of a strong electric field was studied in a vacuum for different types of electrodes. Plasma generated by micro-discharges has been applied in the field of biomedical research and in the field of seed processing for the field of agricultural technology.