



## Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

**APVV-19-0386**

**Iónové a elektrónové procesy pre pokročilé spektrometrické metódy**

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 v Bratislave

### Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Auburn University, Alabama, USA  
University of Kent, Veľká Británia  
Česká akadémia vied, ČR  
Gdansk University of Technology, Poľsko  
National Research Nuclear University MEPhI, Rusko  
University Bremen, Nemecko  
University of Belgrade, Srbsko  
Osaka University, Japonsko  
Open University, Veľká Británia  
Russian Academy of Sciences, Rusko  
Military University of Technology, Poľsko  
Siedlce University, Poľsko  
Masarykova Univerzita v Brne, ČR

### 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

Mészáros D., Matejčík I., Papp P.  
AUTHOR FULL NAMES: Mészáros, Dušan (56020283200); Matejčík, Štefan (7004251651); Papp, Peter (36054674800)  
56020283200; 7004251651; 36054674800  
(2024) Physical Chemistry Chemical Physics, 26 (9), pp. 7522 - 7533  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85185481720&doi=10.1039%2fd3cp05601e&partnerID=40&md5=82efbb2cf56c1888abb67d2536e4ef76>  
Klas M., Čermák P., Borkhari A.F., Satrapinskyy L., Matejčík, Radjenović B., Radmilović-Radjenić M.

AUTHOR FULL NAMES: Klas, Matej (32367611700); Čermák, Peter (25722910500); Borkhari, Arian Fateh (57224173092); Satrapinsky, Leonid (55490601600); Matejčík, Štefan (7004251651); Radjenović, Branislav (12344920900); Radmilović-Radjenović, Marija (12345392500)  
32367611700; 25722910500; 57224173092; 55490601600; 7004251651; 12344920900; 12345392500  
(2021) Vacuum, 191, art. no. 110327  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85107115289&doi=10.1016%2fj.vacuum.2021.110327&partnerID=40&md5=562d8160e1add65eb08a2fa63ecae42e>  
Đurčányová S., Slovákova L., Klas M., Tomeková J., Ďurina P., Stupavská M., Kováčik D., Zahoranová A.  
AUTHOR FULL NAMES: Ďurčányová, Sandra (57972953900); Slovákova, Ľudmila (6603212899); Klas, Matej (32367611700); Tomeková, Juliána (57193214087); Ďurina, Pavol (37074350000); Stupavská, Monika (36844849900); Kováčik, Dušan (6504759931); Zahoranová, Anna (57217156672)  
57972953900; 6603212899; 32367611700; 57193214087; 37074350000; 36844849900; 6504759931; 57217156672  
(2023) Plasma Chemistry and Plasma Processing, 43 (6), pp. 1863 - 1885  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85171374913&doi=10.1007%2fs11090-023-10387-y&partnerID=40&md5=59ef1687c94603c089afe408dde42f43>  
Ďurian J., Hartmann P., Matejčík I., Gibson A.R., Donkó Z.  
AUTHOR FULL NAMES: Ďurian, Ján (57222327641); Hartmann, Peter (57067566700); Matejčík, Štefan (7004251651); Gibson, Andrew R (56440860200); Donkó, Zoltán (7004543286)  
57222327641; 57067566700; 7004251651; 56440860200; 7004543286  
(2022) Plasma Sources Science and Technology, 31 (9), art. no. 095001  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85137264234&doi=10.1088%2f1361-6595%2fac8449&partnerID=40&md5=af1fd8948bc89f195e14597292bd4356>  
Juhász Z., Ďurian J., Derzsi A., Matejčík, Donkó Z., Hartmann P.  
AUTHOR FULL NAMES: Juhász, Zoltan (56941610900); Ďurian, Ján (57222327641); Derzsi, Aranka (24337690100); Matejčík, Štefan (7004251651); Donkó, Zoltán (7004543286); Hartmann, Peter (57067566700)  
56941610900; 57222327641; 24337690100; 7004251651; 7004543286; 57067566700  
(2021) Computer Physics Communications, 263, art. no. 107913  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85102262799&doi=10.1016%2fj.cpc.2021.107913&partnerID=40&md5=5eebd86cefce42ced3734582d1e57da2>  
Čermák P., Cacciani P., Cosléou J.  
AUTHOR FULL NAMES: Čermák, P. (25722910500); Cacciani, P. (6603581336); Cosléou, J. (6603920651)  
25722910500; 6603581336; 6603920651  
(2021) Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 274, art. no. 107861  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85112478774&doi=10.1016%2fj.jqsrt.2021.107861&partnerID=40&md5=102d52db028e8ee942ec12dca4fb0361>  
Moravský L., Michalczyk B., Hrdá J., Hamaguchi S., Matejčík Š.  
AUTHOR FULL NAMES: Moravský, Ladislav (57223187038); Michalczyk, Bartosz (55862196300); Hrdá, Jana (57212755663); Hamaguchi, Satoshi (55220082400); Matejčík, Štefan (7004251651)  
57223187038; 55862196300; 57212755663; 55220082400; 7004251651  
(2021) Plasma Processes and Polymers, 18 (7), art. no. 2100032  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85105223424&doi=10.1002%2fppap.202100032&partnerID=40&md5=1946035f18f5f79daf6e39ad252187a5>  
Fleurbaey H., Čermák P., Campargue A., Kassi S., Romanini D., Votava O., Mondelain D.  
AUTHOR FULL NAMES: Fleurbaey, H. (56733081100); Čermák, P. (25722910500); Campargue, A. (7005480671); Kassi, S. (6602332937); Romanini, D. (7004166308); Votava,

O. (57207902774); Mondelain, D. (6602420686)  
56733081100; 25722910500; 7005480671; 6602332937; 7004166308; 57207902774;  
6602420686  
(2023) Physical Chemistry Chemical Physics, 25 (24), pp. 16319 - 16330  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85163519467&doi=10.1039%2fd3cp01603j&partnerID=40&md5=8d88c73dfe1267078c6e85b705af5e1>  
Blaško J., Országh J., Stachová B., Matejčík Š.  
AUTHOR FULL NAMES: Blaško, J. (59109221300); Országh, J. (22952068600); Stachová, B. (58096842600); Matejčík, Š. (7004251651)  
59109221300; 22952068600; 58096842600; 7004251651  
(2023) European Physical Journal D, 77 (2), art. no. 22  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85147734576&doi=10.1140%2fepjd%2fs10053-023-00602-y&partnerID=40&md5=8349a91946c8df15bd4401fed579e10c>  
Moravský L., Borkhari A.F., Adamov A.Y., Sysoev A.A., Papp P., Matejčík Š.  
AUTHOR FULL NAMES: Moravský, Ladislav (57223187038); Borkhari, Arian Fateh (57224173092); Adamov, Alexey Yu. (7003812477); Sysoev, Alexey A. (7004493882); Papp, Peter (36054674800); Matejčík, Štefan (7004251651)  
57223187038; 57224173092; 7003812477; 7004493882; 36054674800; 7004251651  
(2022) Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 33 (8), pp. 1569 - 1576  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85135596880&doi=10.1021%2fjasms.2c00139&partnerID=40&md5=e0016bf15945371f2420e5b81bf16a48>  
Maťaš E., Moravský L., Ilbeigi V., Matejčík Š.  
AUTHOR FULL NAMES: Maťaš, E. (58092944700); Moravský, L. (57223187038); Ilbeigi, V. (36087549200); Matejčík, Š. (7004251651)  
58092944700; 57223187038; 36087549200; 7004251651  
(2023) European Physical Journal D, 77 (2), art. no. 21  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85147528223&doi=10.1140%2fepjd%2fs10053-023-00603-x&partnerID=40&md5=b314c87562a2fe898019985e08a482f0>  
Országh J., Ribar A., Danko M., Bodewits D., Matejčík Š., Barszczewska W.  
AUTHOR FULL NAMES: Országh, Juraj (22952068600); Ribar, Anita (54409282900); Danko, Marián (56698439700); Bodewits, Dennis (8077103900); Matejčík, Štefan (7004251651); Barszczewska, Wiesława (8930540800)  
22952068600; 54409282900; 56698439700; 8077103900; 7004251651; 8930540800  
(2022) ChemPhysChem, 23 (2), art. no. e202100705  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85120573997&doi=10.1002%2fcphc.202100705&partnerID=40&md5=5f9a3883647c623cddc2cc004d0b1b63>  
Ilbeigi V., Valadbeigi Y., Slovákova L., Matejčík Š.  
AUTHOR FULL NAMES: Ilbeigi, Vahideh (36087549200); Valadbeigi, Younes (36572976600); Slovákova, L'udmila (6603212899); Matejčík, Štefan (7004251651)  
36087549200; 36572976600; 6603212899; 7004251651  
(2022) Journal of Agricultural and Food Chemistry, 70 (49), pp. 15593 - 15601  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85143545527&doi=10.1021%2facsc.2c05570&partnerID=40&md5=604d161a818082174f73b68c7968e842>  
Cacciani P., Čermák P., Vander Auwera J., Campargue A.  
AUTHOR FULL NAMES: Cacciani, P. (6603581336); Čermák, P. (25722910500); Vander Auwera, J. (7003635843); Campargue, A. (7005480671)  
6603581336; 25722910500; 7003635843; 7005480671  
(2022) Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 292, art. no. 108350  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85137767695&doi=10.1016%2fj.jqsrt.2022.108350&partnerID=40&md5=b4754b387c14060fc42c812f7d221578>  
Ilbeigi V., Valadbeigi Y., Moravsky L., Matejčík S.  
AUTHOR FULL NAMES: Ilbeigi, Vahideh (36087549200); Valadbeigi, Younes

(36572976600); Moravsky, Ladislav (57223187038); Matejčík, Štefan (7004251651)  
 36087549200; 36572976600; 57223187038; 7004251651  
 (2023) Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 34 (9), pp. 2051 - 2060  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85167828736&doi=10.1021%2fjasms.3c00225&partnerID=40&md5=aaaac40d061fde4071c1b0d95a4e0df8>  
 Cacciani P., Čermák P., Vander Auwera J., Campargue A.  
 AUTHOR FULL NAMES: Cacciani, P. (6603581336); Čermák, P. (25722910500); Vander Auwera, J. (7003635843); Campargue, A. (7005480671)  
 6603581336; 25722910500; 7003635843; 7005480671  
 (2022) Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 277, art. no. 107961  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85119358697&doi=10.1016%2fj.jqsrt.2021.107961&partnerID=40&md5=7539c0b7e599cf58860b52a3d365765f>  
 Bocková J., Rebelo A., Ryszka M., Pandey R., Mészáros D., Limão-Vieira P., Papp P., Mason N.J., Townsend D., Nixon K.L., Vizcaino V., Pouilly J., Eden S.  
 AUTHOR FULL NAMES: Bocková, J. (57195279098); Rebelo, A. (56245841800); Ryszka, M. (55984408300); Pandey, R. (57202139927); Mészáros, D. (56020283200); Limão-Vieira, P. (8398904700); Papp, P. (36054674800); Mason, N.J. (35461532900); Townsend, D. (8374755900); Nixon, K.L. (7005338770); Vizcaino, V. (13908078300); Pouilly, J. (15077009000); Eden, S. (7004704535)  
 57195279098; 56245841800; 55984408300; 57202139927; 56020283200; 8398904700; 36054674800; 35461532900; 8374755900; 7005338770; 13908078300; 15077009000; 7004704535  
 (2021) RSC Advances, 11 (34), pp. 20612 - 20621  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85108720884&doi=10.1039%2fd1ra01873f&partnerID=40&md5=8f5001d478a0ff589ae969c6c6ed5406>  
 Mészáros D., Papp P., Matejčík Š.  
 AUTHOR FULL NAMES: Mészáros, Dušan (56020283200); Papp, Peter (36054674800); Matejčík, Štefan (7004251651)  
 56020283200; 36054674800; 7004251651  
 (2023) European Physical Journal D, 77 (4), art. no. 62  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85153246314&doi=10.1140%2fepjd%2fs10053-023-00631-7&partnerID=40&md5=c9e36cf52b98eccea6a51e27a3826b7a>  
 Ilbeigi V., Valadbeigi Y., Moravsky L., Matejčík Š.  
 AUTHOR FULL NAMES: Ilbeigi, Vahideh (36087549200); Valadbeigi, Younes (36572976600); Moravsky, Ladislav (57223187038); Matejčík, Štefan (7004251651)  
 36087549200; 36572976600; 57223187038; 7004251651  
 (2022) Analytical and Bioanalytical Chemistry, 414 (20), pp. 6259 - 6269  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85133639716&doi=10.1007%2fs00216-022-04198-x&partnerID=40&md5=dbe2b44f28205767496a68dfae71dcf2>  
 Fateh Borkhari A., Moravský L., Matejčík Š.  
 AUTHOR FULL NAMES: Fateh Borkhari, Arian (55243368200); Moravský, Ladislav (57223187038); Matejčík, Štefan (7004251651)  
 55243368200; 57223187038; 7004251651  
 (2022) Analytical Methods, 14 (14), pp. 1406 - 1413  
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85127832486&doi=10.1039%2fd2ay00186a&partnerID=40&md5=259958a74df0133b8bc540676d7e7a88>

### Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu, ktorý má charakter základného výskumu, nachádzajú uplatnenie najmä v troch hlavných vedeckých oblastiach:

- astrofyzika,
- fyzika plazmy a nanotechnologické aplikácie,
- iónová spektrometria.

V oblasti astrofyziky majú uplatnenie najmä výsledky projektu zamerané na excitačné zrážky a emisná a hmotnostná spektrometria. Tieto dáta sú relevantné pre hlbšiu analýzu a pochopenie astronomických pozorovaní, najmä astronomickej spektroskopie a tiež dát z vesmírnych misií využívajúcich hmotnostnú spektrometriu. Pochopenie kinetiky reakcií prebiehajúcich v astrofyzikálnych prostrediach, ako sú komety, atmosféry, hmloviny a pod., povedie k možnosti lepšej vzdialenej diagnostiky a analýzy spektrálnych dát.

Pre fyziku plazmy sú dôležité najmä výsledky zahŕňajúce kinetiku elektrónmi indukovaných ionizácií, disociácií a elektrónového záchytu. Tie procesy hrajú kľúčovú úlohu vo elektrických výbojoch, ktoré sú hojne využívané v priemysle a vo výskume a vývoji, kde majú uplatnenie pri opracovaní materiálov, nanofabrikácií, či úprave vody pre agropriemysel, pričom ich hlavným prínosom je menšia náročnosť na energiu a ekologický aspekt v porovnaní s chemickými metódami.

Iónová spektrometria má uplatnenie vo viacerých oblastiach ako je štúdium a monitorovanie atmosférických procesov, čo je dôležité z environmentálneho hľadiska, monitorovanie ovzdušia vo výrobných prevádzkach zo zdravotného hľadiska, či monitorovanie stopových koncentrácií látok pri rôznych výrobných procesoch napr. v potravinárskom priemysle.

Rýchlosť a citlivosť sú hlavnými výhodami iónovej spektrometrie spolu s relatívne nenáročnou prevádzkou. Výsledky projektu v tejto oblasti majú priame uplatnenie v ďalšom zdokonaľovaní iónovej spektrometrie a pri vývoji nových zariadení a metód.

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

Projekt má charakter základného výskumu. Hlavným cieľom bolo priniesť nové poznatky o kinetike elektrón-molekulových a ión-molekulových interakcií za pomoci experimentálnych metód využívajúcich rôzne experimentálne metódy ako skrížené elektrón-molekulové zväzky, iónovú pohyblivostnú spektrometriu a emisnú spektroskopiu. Tieto procesy hrajú významné role v rôznych prostrediach a oblastiach od priemyselných aplikácií, cez laboratórny výskum a vývoj, ochranu zdravia a životného prostredia, bezpečnosť až po astrofyzikálny výskum.

Hlavnými cieľmi projektu bolo:

- 1) Získať molekulové dáta o elektrón-molekulových reakciách v atmosférach malých vesmírnych telies.
- 2) Pochopiť úlohu nízko energetických elektrónov v nanotechnologických aplikáciách.
- 3) Vývoj pokročilých spektrometrických aplikácií IMS a IMS-MS.
- 4) Diagnostika procesov atmosférického zdroja elektrónov a výbojov pri atmosférickom tlaku za použitia pokročilých spektrometrických metód.

V rámci prvého cieľa sme študovali malé zlúčeniny relevantné v oblasti astrofyziky, najmä pre pochopenie procesov v atmosférach malých telies ako sú komety a pod. Priniesli sme unikátne emisné spektrá dusíka, kyslíka, oxidu uhličitého a malých organických zlúčenín v doteraz nevídanom rozsahu energií spolu s dátami o emisných účinných prierezoch, aké doteraz neboli známe.

V rámci druhého cieľa sme sa zamerali na štúdium zlúčenín relevantných pre nanotechnologické aplikácie a v porovnaní s mnohými doteraz publikovanými dátami v plynnej fáze sme sa zamerali najmä na kinetiku ionizácie a elektrónového záchytu klastrov. Tretí cieľ znamenal pokračovanie vo vývoji iónovej pohyblivostnej spektrometrie ako mimoriadne rýchlej a citlivej analytickej metódy s uplatnením ako vo výskume, tak v priemysle a bezpečnostných aplikáciách. Študovali sme ión-molekulové reakcie ftalátov a možnosti ich detekcie, detekciu chlórovaných a sírových zlúčenín s ohľadom na ropný priemysel, detekciu a rozklad auxínu a metylsalicilátu s uplatnením vo farmácii.

Štvrtý cieľ sme naplnili charakterizáciou procesov pri prieraze v mikrovýbojoch a procesov v plazmovom jete. Pritom sme sa sústredili na optickú diagnostiku a vývoju simulačného softvéru založeného na metóde Particle-In-Cell.

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

The project is of a fundamental research nature. The main goal was to bring new insights into the kinetics of electron-molecule and ion-molecule interactions using experimental methods such as crossed electron-molecule beams, ion mobility spectrometry (IMS), and emission spectroscopy. These processes play significant roles in various environments and

fields, from industrial applications, laboratory research and development, health and environmental protection, security, to astrophysical research.

The main objectives of the project were:

1. To obtain molecular data on electron-molecule reactions in the atmospheres of small celestial bodies.
2. To understand the role of low-energy electrons in nanotechnology applications.
3. To develop advanced spectrometric applications of IMS and IMS-MS.
4. To diagnose atmospheric electron source processes and discharges at atmospheric pressure using advanced spectrometric methods.

For the first objective, we studied small compounds relevant to astrophysics, especially to understand processes in the atmospheres of small bodies like comets. We provided unique emission spectra of nitrogen, oxygen, carbon dioxide, and small organic compounds over an unprecedented range of energies, along with data on emission cross-sections that were previously unknown.

For the second objective, we focused on studying compounds relevant to nanotechnology applications and, compared to many previously published data in the gas phase, we mainly focused on the kinetics of ionization and electron capture of clusters.

The third objective involved continuing the development of ion mobility spectrometry as an extremely fast and sensitive analytical method with applications in both research and industrial and security applications. We studied ion-molecule reactions of phthalates and their detection possibilities, detection of chlorinated and sulfur compounds with respect to the oil industry, and the detection and decomposition of auxin and methyl salicylate with applications in pharmacy.

The fourth objective was achieved by characterizing processes during breakdown in micro-discharges and processes in the plasma jet. We focused on optical diagnostics and the development of simulation software based on the Particle-In-Cell method.