

## Študijný program / *Study programme:*

### Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

#### Témy dizertačných prác

1. Diagnostika atmosférických výbojov na báze IMS a IMS/MS spektrometrie.....	2
2. Excitácie a žiarenie astrofyzikálne relevantných molekúl vo VUV-UV spektre.....	3
3. Chemické kinetické modelovanie prechodovej iskry.....	4
4. Optická diagnostika prechodovej iskry s elektrostatickým rozprašovaním vody cez výboj.....	5
5. Povrchové úpravy polymérnych materiálov v využití nízko teplotnej plazmy.....	6
6. Presná spektroskopia “malých” molekúl.....	7
7. Štúdium interakcií elektrónov dôležitých pre diagnostiku plazmy.....	9
8. Štúdium ión molekulových procesov pri atmosférickom tlaku a ich aplikácie.....	10
9. Štúdium RF/MW výboja a jeho vplyv na zlepšenie analýzy pomocou metódy LIBS.....	11
10. Využitie štandardných metód kvantovej fyziky pri modelovaní elektrónmi indukovaných procesov.....	12

#### Dissertation Thesis Descriptions

1. Atmospheric pressure diagnostics on the basis of IMS and IMS/MS spektrometry.....	2
2. Chemical kinetic model of transient spark discharge.....	4
3. Electron interaction studies important for diagnostics of plasma.....	9
4. Excitations and emission of molecules relevant for astrophysics in VUV-UV spectrum.....	3
5. Investigation of ion-molecule processes at atmospheric pressure and their applications.....	10
6. Modeling of electron induced processes with standard quantum physical methods.....	12
7. Optical diagnostic of transient spark with electrostatic spray.....	5
8. Precision spectroscopy of “small” molecules.....	7
9. Study of RF/MW discharge and its influence for enhancement analysis using LIBS method.....	11
10. Surface modifications of polymer materials using low temperature plasma.....	6

**Študijný program / Study programme:**

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

**Názov / Title**

Diagnostika atmosférických výbojov na báze IMS a IMS/MS spektrometrie  
*Atmospheric pressure diagnostics on the basis of IMS and IMS/MS spectrometry*

**Jazyk záverečnej práce / Language of Thesis**

slovenský / *Slovak*

**Školiteľ / Tutor**

prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc.

**Anotácia / Annotation**

V rámci dizertačnej práce bude študent študovať atmosférické výboje pomocou IMS a IMS-MS spektrometrie, optimalizovať parametre IMS a IMS-MS spektrometrov pre diagnostiku výbojov a detekovať produkty výbojov pomocou IMS a IMS-MS techniky. Uvedené metódy bude aplikovať na diagnostiku atmosférickej plazmy.

*The student will study atmospheric discharges using IMS and IMS-MS techniques. He will optimise the parameters of IMS and IMS-MS spectrometer for diagnostics of discharges and detect the products of the discharges. These new methods will be applied for diagnostics of the plasmas.*

**Cieľ / Aim**

Cieľom práce bude aplikácia metód IMS a IMS-MS spektroskopie na diagnostiku nízko a vysokoteplotnej plazmy.

*Application of IMS and IMS-MS spectrometric methods for diagnostics of plasmas.*

**Literatúra / Literature**

1) TJM Boyd, JJ Sanderson, The Physics of Plasmas, Cambridge Univ. Press, 2003 2) T Makabe, Z Petrovic, Plasma Electronics: Applications in Microelectronic Device Fabrication, Taylor & Francis, 2006 3) Leopoldo S. García-Colín, Leonardo Dagdug, The Kinetic Theory of a Dilute Ionized Plasma, Springer 2009

## Študijný program / *Study programme:*

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

### Názov / *Title*

Excitácie a žiarenie astrofyzikálne relevantných molekúl vo VUV-UV spektre  
*Excitations and emission of molecules relevant for astrophysics in VUV-UV spectrum*

### Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

anglický / *English*

### Školiteľ / *Tutor*

RNDr. Juraj Országh, PhD.

### Anotácia / *Annotation*

Emisná spektroskopia je jednou z dôležitých metód pri výskume vesmíru. Je jednou z mála metód umožňujúcich analýzu zvoleného objektu na diaľku. Plynné obaly rôznych telies ako sú atmosféry planét a mesiacov, kometárne komy a pod. alebo hmloviny sú pod neustálym vplyvom žiarenia z okolitého vesmíru. Toto žiarenie iniciuje sériu rôznych plazmo-chemických procesov v atmosférach, ako excitácie, ionizácie, rôzne disociatívne reakcie, atď. Tieto procesy budú experimentálne skúmané metódou elektrónmi indukovanej fluorescencie a excitované produkty budú analyzované využitím emisnej spektroskopie. Študent/ka bude zapojený do medzinárodnej vedeckej spolupráce s viacerými zahraničnými výskumnými inštitúciami, najmä z USA a do projektu financovaného NASA.

*Emission spectroscopy is one of the important methods used in space exploration and studies. It is one of a few methods enabling remote analysis of the chosen object. The atmospheres of planets and moons, cometary comas or nebulas are constantly being irradiated from space. It initiates series of plasma-chemical processes such as excitations, ionizations, various dissociative reactions, etc. These processes will be experimentally studied by electron induced fluorescence and excited products will be analysed using emission spectroscopy. The student will be involved in international scientific cooperation with several research institutions, mostly in the USA and in the project funded by NASA.*

### Cieľ / *Aim*

Hlavným cieľom je štúdium elektrón-molekulových reakcií pomocou emisnej spektroskopie v UV a VUV spektrálnej oblasti so zameraním sa na spektrálnu analýzu a emisné účinné prierezy pre vybrané reakcie. Študent/ka bude aktívne spolupracovať na budovaní experimentálnej aparatury a následne pri meraniach, analýze spektier a účinných prierezov.

*The main aim is to study electron-molecule collisions by emission spectroscopy in the UV and VUV spectral region with focus on spectra analysis and emission cross section determination for selected reactions. The student will actively participate in building the scientific apparatus and then measurements, analyses of spectra and cross sections.*

### Kľúčové slová / *Keywords*

fluorescencia, emisná spektroskopia  
*fluorescence, emission spectroscopy*

## Študijný program / *Study programme:*

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

### Názov / *Title*

Chemické kinetické modelovanie prechodovej iskry  
*Chemical kinetic model of transient spark discharge*

### Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

slovenský / *Slovak*

### Školiteľ / *Tutor*

doc. RNDr. Mário Janda, PhD.

### Anotácia / *Annotation*

Prechodová iskra (PI) je výboj používaný v našej skupine na viaceré environmentálne a biomedicínske aplikácie. PI totiž generuje vysokoreaktivnú plazmu a počas krátkych prúdových pulzov môže koncentrácia elektrónov presiahnuť  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Chemické kinetické modelovanie nám umožní lepšie pochopenie prechodovej iskry a prebiehajúcej plazmochémie.

*The transient spark (TS) is a dc-operated, self-pulsing and filamentary discharge with typical repetition rate in the range 1-10 kHz. Fundamental research of the positive polarity TS revealed that it is characteristic by the short (~10-100 ns) spark current pulses, having maximum amplitude in the range of a few Amps. Thanks to short spark pulse duration and limited amount of deposited energy (~1 mJ/pulse), significant heating of the treated gas is avoided and the generated plasma is non-equilibrium and highly reactive, with an electron density above  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . These reactive plasma properties predetermine the TS for several biomedical and environmental applications. The modeling of chemical kinetics aiming to calculate the density evolution of all species included in the kinetic model is an effective tool for complex systems description. In many cases, it is the most powerful way to solve problems where the complexity inhibits using analytical methods and direct experimental measurements. The chemical kinetic modeling could also help us to improve our understanding of the TS discharge evolution, the transition from streamer to gas breakdown and spark formation. This model can be used to determine the evolution of density of species, which are not measurable via available experimental techniques.*

### Cieľ / *Aim*

Vylepšenie chemického kinetického modelu vhodného na skúmanie prechodovej iskry. Preskúmanie mechanizmov prierazu a tvorby reaktívnych častíc ako N, O, NO<sub>x</sub>.

*Improvement of chemical kinetic model to fit the needs of transient spark discharge. Study of breakdown mechanism and reaction pathways for generation of reactive particles such as NO<sub>x</sub>, N and O.*

### Literatúra / *Literature*

M. Capitelli, C. M. Ferreira, B. F. Gordiets, and A. I. Osipov, *Plasma Kinetics in Atmospheric Gases* (Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics). New York, NY, USA: Springer-Verlag, 2000. Janda M et al. (2011) *Plasma Sources Sci Technol* 20:035015

*M. Capitelli, C. M. Ferreira, B. F. Gordiets, and A. I. Osipov, Plasma Kinetics in Atmospheric Gases (Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics). New York, NY, USA: Springer-Verlag, 2000. Janda M et al. (2011) Plasma Sources Sci Technol 20:035015*

### Kľúčové slová / *Keywords*

transient spark, chemical kinetic model, plasma chemistry  
*transient spark, chemical kinetic model, plasma chemistry*

## Študijný program / *Study programme:*

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

### Názov / *Title*

Optická diagnostika prechodovej iskry s elektrostatickým rozprašovaním vody cez výboj.  
*Optical diagnostic of transient spark with electrostatic spray.*

### Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

slovenský / *Slovak*

### Školiteľ / *Tutor*

doc. RNDr. Mário Janda, PhD.

### Anotácia / *Annotation*

Navrhujeme štúdium elektrostatického rozprašovania vody elektrickými výbojmi. Proces budeme sledovať optickými diagnostickými metódami. Okrem klasickej vizualizácie pomocou vysokorýchlostnej kamery plánujeme zostaviť a otestovať novú metódu založenú na interakcii rozprašovaných mikrokvapôčiek s jedným alebo dvoma planárnymi laserovými lúčmi. Sledovať budeme rozptýlené žiarenie aj priestorovo závislé zmeny intenzity v samotných lúčoch. Táto metóda by mala umožniť lepšie a rýchlejšie skúmanie efektu elektrického rozprašovania rôznymi elektrickými výbojmi, pre vody s rôznou vodivosťou a rôznou rýchlosťou prúdenia cez výboj. Cieľom je nájsť režim pri ktorom sa vo vode pri prechode cez výboj vytvorí najväčšie množstvo dusitanov a dusičnanov z rozpusteného NO<sub>x</sub> a OH radikálov vytvorených výbojom v plynnej fáze v interakcii s rozprašovanou vodou. Dusitany a peroxidy totiž hrajú dôležitú úlohu pri inaktívácii baktérií v kontaminovanej vode opracovanej elektrickým výbojom.

*We propose to study the electrospray of water by electrical discharges. We will use fast time-resolved optical diagnostic methods for this purpose. Besides the visualization using high-speed cameras, we plan to build and test a new method based on the interaction of sprayed micro-droplets with one or two planar laser beams. We will monitor the scattered radiation as well as intensity changes in laser beams themselves. This method will allow us better and faster examination of the electrospray effect using different electrical discharges, waters of different conductivities and different flow rates. The aim is to find an electrospray mode in which the highest density of nitrites, nitrates and hydrogen peroxide is formed in the water from NO<sub>x</sub> and OH generated in the gas phase. Nitrites and peroxides play an important role in the bio-decontamination of water as one of the key biocidal agents. This project is thus related to the research of the bio-decontamination of water by plasma studied in our group.*

### Cieľ / *Aim*

Cieľom práce je preskúmať niekoľko typov elektrických výbojov používaných v našej pracovnej skupine v interakcii s vodnou hladinou. U stremerovej koróny a prechodovej iskry budeme študovať aj efekt nazývaný elektrostatické rozprašovanie. Cieľom je zistiť vplyv veľkosti povrchu mikrokvapiek na rýchlosť transportu rôznych reaktantov z plazmy.

*The aim of this work is to visualize the interaction of streamer corona and transient spark with water surface. Moreover, we plan to study the electrospray effect in co-existence with these discharges. The aim is to correlate size/surface of microdroplets with mass transfer rate from plasma to liquid for various plasma species.*

### Kľúčové slová / *Keywords*

elektrické výboje, optická diagnostika, elektrostatické rozprašovanie  
*electrical discharges, optical diagnostic, electrostatic spray*

**Študijný program / Study programme:**

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

**Názov / Title**

Povrchové úpravy polymérnych materiálov v využití nízko-teplotnej plazmy.  
*Surface modifications of polymer materials using low temperature plasma.*

**Jazyk záverečnej práce / Language of Thesis**

slovenský / *Slovak*

**Školiteľ / Tutor**

doc. RNDr. Anna Zahoranová, PhD.

**Anotácia / Annotation**

Nízko-teplotná plazma sa v súčasnosti stále viac využíva na povrchové úpravy rôznych materiálov s cieľom zlepšiť adhéziu, prípadne dosiahnuť požadované vlastnosti ako je napríklad antimikrobiálna úprava a iné. Nízko-teplotnú plazmu možno s výhodou použiť aj na termolabilné materiály ako sú polyméry, na čistenie a aktiváciu povrchu.

**Cieľ / Aim**

Cieľom práce bude plazmová úprava rôznych druhov polymérnych materiálov pomocou plazmy generovanej pri atmosférickom tlaku, porovnanie efektívnosti plazmovej úpravy, jej starnutia, vzhľadom na viaceré podmienky generovania plazmy.

## Študijný program / *Study programme:*

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

### Názov / *Title*

Presná spektroskopia "malých" molekúl  
*Precision spectroscopy of "small" molecules*

### Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

slovenský / *Slovak*

### Školiteľ / *Tutor*

doc. Mgr. Peter Čermák, PhD.

### Anotácia / *Annotation*

Modelovanie ro-vibračných elektronických prechodov, prítomných v emisných spektrách, je kľúčovou schopnosťou ako získať informácie o distribúcii energie vo výbojoch. Tieto údaje predstavujú dôležitý diagnostický nástroj, ktorý nám pomáha pochopiť fyziku a chémiu takýchto nerovnovážnych prostredí. V článku [1] sme uviedli prvú aplikáciu ro-vibračného modelu N<sub>2</sub> Herman-infrared (HIR) pre metrológiu dielektrického bariérového výboja pri atmosférickom tlaku. Na základe našej práce v UV časti spektra [2], sme potom vyvinuli algoritmus, ktorý umožňuje automaticky určiť tak rotačnú teplotu, ako aj citlivosť detekčnej schémy priamo zo spektra výboja, bez potreby predkalibrácie. Následne sme porovnávali výsledky z 2PS, NO $\gamma$  a HIR systémov a pomocou analýzy Monte Carlo kvantifikovala stabilita a presnosť určovania rotačnej teploty z jednotlivých systémov. Cieľom projektu je pokračovať v tomto smere výskumu a preskúmať, do akej miery ovplyvňuje výber emitujúceho systému alebo detekčnej schémy kvalitu a absolútnu presnosť hodnôt získaných zo spektier. V predchádzajúcej štúdii [1] bola variabilita testovacích podmienok obmedzená podmienkami danými experimentom (ako výbojom, tak aj detekčnou schémou). V tomto prípade sa problém obíde použitím "virtuálnych" simulovaných signálov. Je to veľmi podobný prístup, ktorý sme použili už pri absorpčných spektrách CO<sub>2</sub> [3], pri ktorých simulácia blízka skutočnosti umožnila navrhnuť presnejší algoritmus na spracovanie spektier.

*The modeling of ro-vibrational electronic transitions present in the emission spectra is a key ability to extract the information about energy distribution within different states of species in the discharges. These data represent an important diagnostic tool, which helps us to understand the physics and chemistry of such non-equilibrium processes. In our previous paper [1], we reported on the first application of the N<sub>2</sub> Herman-infrared (HIR) ro-vibrational model for the metrology of the atmospheric-pressure dielectric-barrier discharge. Based on our work in the UV part of spectra [2], we have developed a fitting algorithm which allows determining automatically both the rotational temperature and the sensitivity of the detection scheme directly from the recorded discharge spectrum without any need of pre-calibration. In the Ref. [1] the results from here mentioned 2PS, NO $\gamma$ , and HIR systems were compared and a first-order Monte Carlo type of analysis of the models was performed to quantify the stability regarding the sensitivity calibration process. This work aims to continue in this direction and investigate to what extent the selection of emission system or detection scheme affect the quality and absolute precision of values retrieved from the fit. In the previous study [1], the variability of testing conditions was limited by the conditions given by the experiment (both the discharge and the detection scheme). In the present case, the issue is circumvented by using "virtual" - simulated signals. It is a very similar approach, we applied already in case of CO<sub>2</sub> absorption spectra [3], where a close-to-real simulation of its absorption spectra allowed to benchmark new fitting algorithm.*

### Cieľ / *Aim*

I. Naprogramovanie generátora experimentálnych emisných spektier. II. Naprogramovanie analyzátoru experimentálnych emisných spektier. III. Aplikácia zostrojenej dvojice programov

na určovanie vplyvu výberu emisného systému, detekčnej schémy a algoritmu spracovania spektier na presnosť a stabilitu výsledku.

*I. Design of the program for simulation of experimental emission spectra. II. Design of the program for analysis of experimental emission spectra. III. Application of the designed programs for the determination of the influence of the selected parameters (radiating transition, detection scheme, and data-treatment algorithm) on the precision and stability of the experimental parameters retrieval.*

#### **Literatúra / Literature**

[1] Čermák P, Annušová A, Rakovský J, Martišovits V and Veis P 2018 Plasma Sources Sci. Technol. 27 055009. [2] Rakovský J, Krištof J, Čermák P, Kociánová M and Veis P 2011 WDS'11 Proceedings of Contributed Papers, Part II, 257-262. [3] Hovorka J, Čermák P and Veis P 2017 Laser Phys. 27 055701

*[1] Čermák P, Annušová A, Rakovský J, Martišovits V and Veis P 2018 Plasma Sources Sci. Technol. 27 055009. [2] Rakovský J, Krištof J, Čermák P, Kociánová M and Veis P 2011 WDS'11 Proceedings of Contributed Papers, Part II, 257-262. [3] Hovorka J, Čermák P and Veis P 2017 Laser Phys. 27 055701*

#### **Kľúčové slová / Keywords**

emisná spektroskopia, spracovanie spektier, optimalizácia  
*emission spectroscopy, spectra analysis, optimization*



## Študijný program / *Study programme:*

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

### Názov / *Title*

Štúdium interakcií elektrónov dôležitých pre diagnostiku plazmy.  
*Electron interaction studies important for diagnostics of plasma.*

### Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

anglický / *English*

### Školiteľ / *Tutor*

prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc.

### Anotácia / *Annotation*

V rámci dizertačnej práce bude študent študovať ionizačné interakcie elektrónov s molekulami a klastrami. Reakcie bude skúmať metódami, ktoré sú k dispozícii na KEF a na iných pracoviskách v zahraničí. Na súmame sa použije metóda skrížených elektrónových a molekulových zväzkov s využitím hmotnostnej spektroskopie. Výsledkom štúdia bude určenie účinných prierezov pre uvedené reakcie, prahových energií reakcií, disociácie molekúl, meranie produktov reakcií.  
*Experimental and theoretical studies of electron interactions with molecules and clusters using experimental equipment present at Department of Experimental Physics and at collaborating institutions in abroad. Basic setup is crossed electron /molecular beam apparatus with mass spectrometer, or UV-VIS optical monochromator for detection of photons. Main results of research are kinetic data regarding electron interactions (cross sections), mass spectra or emission spectra of molecules and threshold energies of the reactions.*

### Cieľ / *Aim*

Cieľom dizertačnej práce je štúdium excitačných a ionizačných reakcií elektrónov s molekulami relevantnými pre hraničnú oblasť plazmy tokamaku.  
*The main goal of the thesis is study of excitation and ionisation reactions relevant for the edge plasma of tokamak reactors.*

### Literatúra / *Literature*

- 1) H. Hutchinson. "Principles of Plasma Diagnostics,". Cambridge University Press, Cambridge. 2005
  - 2) T.J.M. Boyd, J.J. Sanderson, *The Physics of Plasmas*, Cambridge Univ. Press, 2003
  - 3) Leopoldo S. García-Colín, Leonardo Dagdug, *The Kinetic Theory of a Dilute Ionized Plasma*, Springer 2009
- 2) T.J.M. Boyd, J.J. Sanderson, *The Physics of Plasmas*, Cambridge Univ. Press, 2003
- 3) Leopoldo S. García-Colín, Leonardo Dagdug, *The Kinetic Theory of a Dilute Ionized Plasma*, Springer 2009

**Študijný program / Study programme:**Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

**Názov / Title**

Štúdium ión molekulových procesov pri atmosférickom tlaku a ich aplikácie

*Investigation of ion-molecule processes at atmospheric pressure and their applications.***Jazyk záverečnej práce / Language of Thesis**slovenský / *Slovak***Školiteľ / Tutor**

prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc.

**Anotácia / Annotation**

V rámci dizertačnej práce sa bude študent venovať ión molekulovým procesom prebiehajúcich pri atmosférickom tlaku v iónových pohyblivostných spektrometroch (IMS). Štúdium uvedených procesov bude realizované na zariadení IMS kombinovanom s hmotnostným spektrometrom.

*Within the PhD work the student will study ion-molecule processes at atmospheric pressure associated with ion mobility spectrometry (IMS). The ion-molecule reaction will be studied at IMS-mass spectrometry apparatus. The goal of the study is detection of explosives (TNT, RDX, PETN...) as well as the ion molecule processes relevant to these compounds.*

**Cieľ / Aim**

Cieľom práce bude aplikácia metód iónovej pohyblivostnej spektrometrie a hmotnostnej spektroskopie v oblasti štúdia ión molekulových interakcií pri atmosférickom tlaku, štúdium kinetiky procesov podieľajúcich sa na ionizácii.

*The aim of the PhD thesis is the application of ion mobility spectrometry and mass spectrometry for ion-molecule reaction studies at atmospheric pressure, studies of the kinetic of reactions as well as analysis of the products of the reactions.*

**Literatúra / Literature**

1) G.A. Eiceman, Z. Karpas, Herbert H. Hill, Jr., Ion Mobility Spectrometry, Third Edition, CRC Press 2013 2) Charles L. Wilkins, Sarah Trimpin, Ion Mobility Spectrometry - Mass Spectrometry: Theory and Applications, CRC Press 2014 3) J. Franklin, Ion-Molecule Reactions, Springer Science & Business Media 2012

*1) G.A. Eiceman, Z. Karpas, Herbert H. Hill, Jr., Ion Mobility Spectrometry, Third Edition, CRC Press 2013 2) Charles L. Wilkins, Sarah Trimpin, Ion Mobility Spectrometry - Mass Spectrometry: Theory and Applications, CRC Press 2014 3) J. Franklin, Ion-Molecule Reactions, Springer Science & Business Media 2012*

## Študijný program / *Study programme:*

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

### Názov / *Title*

Štúdium RF/MW výboja a jeho vplyv na zlepšenie analýzy pomocou metódy LIBS  
*Study of RF/MW discharge and its influence for enhancement analysis using LIBS method*

### Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

slovenský / *Slovak*

### Školiteľ / *Tutor*

prof. RNDr. Pavel Veis, CSc.

### Anotácia / *Annotation*

Pri štandardnej LIBS metóde je na dosiahnutie vhodného signálu pre analýzu experimentálnych dát potrebné zaznamenať spektrum pozostávajúce s akumulácie viacerých (rádovo 100) výstrelov do vzorky. V súčasnosti sa často krát stretávame s potrebou analýzy vzoriek tenkých vrstiev, kde takáto vysoká akumulácia vzhľadom na hrúbku materiálu nie je možná. Riešením daného problému je metóda, ktorá by nám umožňovala zosilniť získaný signál. Veľmi populárnou je metóda tzv. dvoj impulznej LIBS pri ktorej je využitý prvý laserový lúč na abláciu materiálu a generáciu plazmy a následne druhý na opätovnú reexcitáciu zhášanej plazmy. Typická doba života lasero indukovanej plazmy je niekoľko  $\mu\text{s}$ . Za účelom reexcitácie plazmy je možné využiť aj RF alebo mikrovlnný (MW) výboj, ktorého výhodou je predĺženie doby života plazmy, mnohonásobne viac ako pri dvoj impulznej LIBS. Vďaka tomu je možné pozorovať aj spektrálne čiary, ktorých doba života je kratšia a pri dvoj impulznej LIBS nie je možné ich významné zosilnenie. V tejto práci sa budeme venovať štúdiu vplyvu RF resp. MW výboja pri zosilnení výsledného signálu a ako aj optimalizácii nastavení pre zosilnenie spektrálnych čiar zodpovedajúcim rozličným prvkom v závislosti od dĺžky oneskorenia, dĺžky zaznamenania signálu, tlaku a atmosféry v ktorej budú merania prebiehať.

### Cieľ / *Aim*

Štúdium parametrov vplývajúcich na zosilnenie signálu a optimalizácia prejednotlivé spektrálne čiary.

### Literatúra / *Literature*

[1] Cremers, D. A., Radziemski, L. J. Handbook of Laser- Induced Breakdown Spectroscopy. Chichester (England): John Wiley & Sons, Ltd, 2006. ISBN 978-0- 470 09299-6 [2] O. Ayed Nassef a Hani E. Elsayed – Ali, Spark discharge assisted laser induced breakdown spectroscopy, Spectrochimica Acta Part B 60 (2005), 1564- 1572. [3] Y. Ikeda a M. Kaneko, Microwave- Enhanced Laser- Induced Breakdown Spectroscopy, 14th Symp. On Appl. Laser Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, Portugal, July 07-10. 2008. [4] K. A. Tereszchuk a kol., Depth profile of layered samples using glow discharge assisted Laser\_ induced Breakdown Spectrometry (GD- LIBS), Spectrochimica Acta Part B 64 (2009), 378- 383 [5] L. I. Kexue a kol., Signal enhancement of lead and arsenic in soil using laser ablation combined with fast electric discharge, Spectrochimica Acta Part B 65 (2010), 420-424. [6] J.D. Pedaring a kol., Combination of RF- plasma jet and Laser- induced plasma for breakdown spectroscopy analysis of complex materials, Applied Surface Science 257 (2011), 5452-5455. [7] S. Eschlböck\_ Fuchs a kol., Boosting persistence time of laser- induced plasma by electric arc discharge for optical emission spectroscopy, Spectrochimica Acta Part B 109 (2015), 31- 38.

### Kľúčové slová / *Keywords*

Laserom indukovaná plazma, laserová ablácia, RF výboj, MW výboj, spektrálne čiary

## Študijný program / *Study programme:*

Fyzika plazmy / *Plasma Physics*

---

### Názov / *Title*

Využitie štandardných metód kvantovej fyziky pri modelovaní elektrónmi indukovaných procesov.  
*Modeling of electron induced processes with standard quantum physical methods.*

### Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

slovenský / *Slovak*

### Školiteľ / *Tutor*

RNDr. Peter Papp, PhD.

### Anotácia / *Annotation*

Charakterizácia vlastností molekúl, konformačné štúdie, optimálne geometrie, energie základného stavu, excitovaných stavov, ionizačné energie, elektrónové afinity, protinizačné energie, väzobné energie, pomocou teoretických metód kvantovej chémie. Využitie osvojených poznatkov z modelovania na interpretáciu experimentu elektrónmi stimulovaných reakcií na molekulách.

### Cieľ / *Aim*

Cieľom dizertačnej práce je oboznámiť sa so súčasnými metódami kvantovej fyziky a ich využitie pri interpretácii experimentov na oddelení fyziky plazmy katedry experimentálnej fyziky. V práci sa budú používať rôzne existujúce funkcionály Density Functional Method teórie, ktoré nekladú príliš veľké nároky na počítačové vybavenie. DFT výsledky sa budú porovnávať s inými ab initio výpočtami na úrovni poruchovej teórie druhého a vyšších rádov a ich modifikácií za účelom dosiahnutia vyšších presností v absolútnych energiách, metód spriahnutých klastrov a variačného princípu ako aj iných súčasných prístup. Tieto metódy však už kladú pomerne vysoké nároky na počítačový hardware a preto bude potrebné nájsť optimálne riešenie pri ich použití. Vďaka realizovaným výpočtom pomocou súčasných metód kvantovej fyziky bude možné identifikovať základné stavy molekúl a ich geometrie v plynnom skupenstve. Takto dosiahnuté výsledky sa potom budú porovnávať s experimentálnymi výsledkami hlavne z hmotnostnej spektrometrie a elektrónmi indukovanej fluorescence na biomolekulách, molekulách relevantných pre moderné nanotechnológie, fúzne procesy, či molekulové systémy zaujímavé z hľadiska environmentálneho zaťaženia. Absolvent tak získa poznatky a skúsenosti nie len v oblasti teoretického modelovania základných charakteristík molekulových systémov, ale z časti aj samotného experimentu.

### Literatúra / *Literature*

1. P.W.Atkins and R.S.Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press 2005
2. D.C.Young, Computational Chemistry: A practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems, John Wiley & Sons 2001
3. Bartosz Michalczuk, Ladislav Moravský, Peter Papp, Pavel Mach, Martin Sabo and Štefan Matejčík, Isomer and conformer selective atmospheric pressure chemical ionisation of dimethyl phthalate, Phys. Chem. Chem. Phys., 2019, 21, 13679-13685.
3. P.Papp, J.Urban, Š. Matejčík, M.Stano, O.Ingolfsson, Dissociative Electron Attachment to Gas Phase Valine: A Combined Experimental and Theoretical Study, The Journal of Chemical Physics 125, 204301 (2006)