

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-VIS spektre.....	3
3. Charakterizácia radio-frekvenčných mikrovýbojov.....	4
4. Chemické kinetické modelovanie prechodovej iskry.....	5
5. Ionizačné procesy molekúl a molekulových klastrov využívaných v moderných depozičných technológiách.....	6
6. Optická diagnostika prechodovej iskry s elektrostatickým rozprašovaním vody cez výboj.....	7
7. Optická emisná diagnostika fúznej plazmy v oblasti divertorov.....	8
8. Využitie štandardných metód kvantovej fyziky pri modelovaní elektrónmi indukovaných procesov.....	9

Dissertation Thesis Descriptions

1. Atmospheric pressure diagnostics on the basis of IMS and IMS/MS spektrometry.....	2
2. Characterizations of radio frequency microdischarges.....	4
3. Chemical kinetic model of transient spark discharge.....	5
4. Excitations and emission of molecules relevant for astrophysics in VUV-VIS spectrum.....	3
5. Ionization processes of molecules and molecular clusters used in novel deposition technologies.....	6
6. Modeling of electron induced processes with standard quantum physical methods.....	9
7. Optical diagnostic of transient spark with electrostatic spray.....	7
8. Optical emission diagnostics of fusion plasma in the divertor region.....	8

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-VIS spektre

*Excitations and emission of molecules relevant for astrophysics in VUV-VIS 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 renomovanými zahraničnými výskumnými inštitúciami, najmä z USA a Veľkej Británie.

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 renowned research institutions, mostly in the USA and UK.

Cieľ / Aim

Hlavným cieľom je štúdium elektrón-molekulových reakcií pomocou emisnej spektroskopie v VIS-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 aparatúry a následne pri meraniach, analýze spektier a účinných prierezov.

The main aim is to study electron-molecule collisions by emission spectroscopy in the VIS-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*

Charakterizácia radio-frekvenčných mikrovýbojov
Characterizations of radio frequency microdischarges

Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

slovenský / *Slovak*

Školiteľ / *Tutor*

RNDr. Matej Klas, PhD.

Anotácia / *Annotation*

Plazma generovaná elektrickými výbojmi pri atmosférickom alebo blízko atmosférického tlaku sa stáva čoraz rozšírenejším aplikačným prostriedkom. Takýmto zdrojom plazmy sú aj mikrovýboje ktoré sú generované medzi elektródami so vzájomnou vzdialenosťou niekoľko mikrometrov. Na mikrometrickej vzdialenosti už Paschenov zákon prestáva platiť kvôli vysokému elektrickému poľu. Určenie hranice jeho platnosti je preto veľmi dôležité kvôli aplikácie mikrovýbojov v priemysle. Okrem zapálenia DC poľom mikrovýboje môžu byť zapálené aj AC poľom. Menej preštudovanou oblasťou sú mikrovýboje generované vysokofrekvenčným elektrickým poľom. Predkladaný projekt má za cieľ postavenie vákuovej aparatury na skúmanie mikrovýbojov budených nízkofrekvenčnými a vysokofrekvenčnými zdrojmi v rôznych plynch a overenie platnosti Paschenovho zákona pri mikrometrických vzdialenostiach elektród. Z určených hodnôt zápalného napätia a z priebehov elektrického napätia a prúdu by bolo možné určiť koeficient sekundárnej emisie, ktorý je dôležitý pre simulovanie a optimalizáciu mikrovýbojov. Namerané hodnoty by boli použiteľné aj na určenie primárneho mechanizmu zapálenia mikrovýbojov, a na vysvetlenia procesov odohrávajúcich vo výbojovom priestore pri vyšších frekvenciách. Optickou emisnou spektroskopiou by sa určili základné excitované častice ktoré sa vytvárajú vo výbojovom priestore.

Cieľ / *Aim*

Cieľom tohto dizertačnej práce je skúmanie mikrovýbojov budených nízkofrekvenčnými a vysokofrekvenčnými zdrojmi v rôznych plynch, a následne porovnávanie výsledkov s predchádzajúcimi meraniami. Zameriame sa na určenie zápalných napätí mikrovýbojov v závislosti od budiacej frekvencie, vzájomnej vzdialenosti elektród, tlaku a typu plynu. Časť výskumu bude aj stanovenie hranice platnosti Paschenovho zákona a výpočet koeficientu sekundárnej emisie, ktorý je dôležitý pre simulovanie a optimalizáciu mikrovýbojov. V pláne je aj zostrojenie vhodnej aparatury s vyhrievacím zariadením na štúdium vlastností mikrovýbojov generovaných do vodných parách. Kvôli presnosti určenia zápalných napätí pri vzájomných vzdialenostiach elektród jednotiek mikrometrov bude nutná dostatočne hladná úprava elektród, ako aj modifikácia aparatury a návrh zdrojov pre vysoké frekvencie (MHz).

Kľúčové slová / *Keywords*

mikrovýboje, plazma , RF
microdischarges. Plasma , RF

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} 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} 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_x.

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_x, 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*

Ionizačné procesy molekúl a molekulových klastrov využívaných v moderných depozičných technológiách.

Ionization processes of molecules and molecular clusters used in novel deposition technologies.

Jazyk záverečnej práce / *Language of Thesis*

slovenský / *Slovak*

Školiteľ / *Tutor*

RNDr. Peter Papp, PhD.

Anotácia / *Annotation*

Dizertačná práca je zameraná na charakterizáciu ionizačných procesov v molekulách a molekulových klastroch pomocou hmotnostnej spektrometrie. Okrem kvalitatívneho stanovenia, aké produkty vznikajú vďaka ionizácii elektrónom alebo záchytom elektrónu, budú hlavným prínosom kvantitatívne charakteristiky týchto procesov, ionizačné energie, disociačné energie pri fragmentáciách, elektrónové či protónové afinity, relatívne účinné prierezy procesov.

Vďaka prístrojovému vybaveniu na KEF FMFI UK budú procesy študované nielen pomocou experimentálneho vybavenia v laboratóriu hmotnostnej spektrometrie ale aj pomocou teoretického modelovania za účelom presnejšej interpretácie výsledných produktov a k nim vedúcich procesov.

This thesis is about the characterisation of ionization processes using the mass spectrometry technique, for molecules and molecular clusters. The quantitative results will give us an insight into the formation of products via electron ionization and electron attachment. Additionally, the qualitative aspects of these processes will be studied to evaluate the ionization energies, dissociation energies of fragmentation processes, electron and proton affinities, relative cross sections. Both the experimental techniques of the Mass Spectrometry Laboratory at the Department of Experimental Physics and theoretical modelling will be used to get more detailed description of the processes.

Cieľ / *Aim*

Cieľom dizertačnej práce bude presná identifikácia produktov elektrón-molekulových či klastrových reakcií ionizačného charakteru a energetická bilancia reakcií nízkoenergetických elektrónov s molekulami relevantnými pre moderné plazmové či nano-technológie.

The main goal of this thesis is the detailed identification of electron-molecular and electron-cluster interactions, ionization reactions, the energetical profile of low-energy electron interactions with molecules and cluster relevant for novel plasma- and electron induced nano-technologies.

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.
4. 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)

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 dusičňanov z rozpusteného NO_x 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_x 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

Optická emisná diagnostika fúznej plazmy v oblasti divertorov
Optical emission diagnostics of fusion plasma in the divertor region

Jazyk záverečnej práce / Language of Thesisslovenský / *Slovak***Školiteľ / Tutor**

prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc.

Anotácia / Annotation

V rámci dizertačnej práce bude študent študovať procesy prebiehajúce vo fúznych reaktoroch metódou optickej emisnej spektroskopie. Študent po dohovore so školiteľom sa môže rozhodnúť pre detekciu spektier molekúl relevantných pre divertorovú časť fúznej plazmy, ktoré slúžia predovšetkým na chladenie divertora. Interakcie relevantné pre diagnostiku plazmy budeme skúmať metódami, ktoré sú k dispozícii na KEF a v rámci tejto problematiky existuje široká spolupráca pracoviska so zahraničím.

Cieľ / Aim

Cieľom dizertačnej práce je optická emisná diagnostika procesov prebiehajúcich v divertorovej vrstve fúznych reaktorov a relevantných interakcií elektrónov s molekulami pre túto oblasť reaktorov. Výsledkom štúdia bude určenie dôležitých parametrov plazmy v oblasti divertora a vplyvu molekulových prímiesí na plazmu v oblasti divertora.

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.
Quantum chemical calculations of molecular properties, conformational studies, optimal geometries, ground state energies, energies of excited states, ionization energies, electron affinities, proton affinities, bond energies. This knowledge will be useful for theoretical interpretation of the results from electron induced experiments.

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 Theory metód, 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.
The main goal of this thesis is to become an expert in application of recent quantum chemical methods for obtaining basic molecular properties and interpretation of electron induced experiments at the Department of Experimental Physics. The Density Functional Theory methods will be used for fast and "low cost" approach to calculate the molecular properties. This will be compared with higher accuracy ab initio methods, based on perturbation theory of second and higher orders, coupled cluster methods. Due to higher hardware costs of the ab initio methods an optimal choice between DFT and lower level of ab initio calculations will be learned. The theoretical results will reflect to the actual needs of our experimental studies with mass spectrometry and electron induced fluorescence, with biomolecules, molecules relevant for modern deposition techniques, fusion, or environmental hazards.

Literatúra / *Literature*

1. P.W. Atkins and R.S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press 2005
D.C. Young, *Computational Chemistry: A practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*, John Wiley & Sons 2001
2. 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)