

TÉMATA DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU TECHNICKÁ KYBERNETIKA PRO AKADEMICKÝ ROK 2017-2018

VŠCHT Praha – Ústav fyziky a měřicí techniky

Využití nanostrukturovaných a nanoporezních materiálů pro senzory plynů Utilisation of nanostructured and nanoporous materials for gas sensors

Školitel / Supervisor: Ing. Přemysl Fítl, Ph.D., Školitel specialista / Co-supervisor: doc. Ing. Dr. Martin Vršata

Významný rozvoj technologií přípravy nanomateriálů v posledních dvou dekáдах umožnil přípravu celé řady sensoricky aktivních materiálů s unikátní strukturou a vlastnostmi. Poměrně jednoduchými vakuovými technikami je dnes z materiálů používaných pro chemické senzory možno připravovat nanočástice, nanodráty, případně nanotrubičky definovaných rozměrů a tvarů na celé řadě substrátů. Z hlediska chemické sensoriky vykazují takto nanostrukturované materiály v mnoha směrech unikátní vlastnosti (nízká pracovní teplota, vysoká citlivost a selektivita). Cílem práce bude návrh a realizace senzorů s různě nanostrukturovanými aktivními vrstvami, nosiči aktivních vrstev a příprava selektivních nanomembrán nad aktivní detekční vrstvou.

English: Significant development of technology of nanomaterials in the last two decades has enabled the preparation of a wide range of materials for sensoric applications with unique structure and properties. By utilization of relatively simple vacuum techniques it is possible to prepare nanoparticles, nanowires and nanotubes of defined dimensions and shapes on a variety of substrates. From the point of view of chemical sensing such nanostructured materials show unique properties (low working temperature, high sensitivity and selectivity). The goal of this work will be the design and implementation of sensors with different nanostructured active layers, nanostructured carriers of active layers and preparation of selective nanomembranes above the active layer of chemical sensors.

Specifické receptory v chemických senzorech Specific receptors in chemical sensors

Školitel / Supervisor: Ing. Dušan Kopecký, Ph.D., školitel specialista / Co-supervisor: Doc. Ing. Dr. Martin Vršata

Stávající experimentální chemické senzory na bázi organických látek jsou progresivní elektronické součástky, které však stále trpí řadou neduhů, zabraňujících jejich nasazení do reálných aplikací. Fundamentálním nedostatkem těchto chemických senzorů je jejich nízká selektivita. V praxi se takové senzory projevují vysoce citlivou odezvou na nízké koncentrace různých plynů a par, avšak zároveň nejsou schopny rozlišovat mezi detekovaným analytem a případnými interferenty. V současné době je proto testována řada metod, které by měly tyto problémy překonat. Mezi nejdůležitější patří například molekulární imprinting nebo metody, na které cílí tato práce - chemické a fyzikální funkcionalizace citlivého materiálu chemického senzoru.

Cílem práce je systematicky prozkoumat vybrané metody chemické a fyzikální funkcionalizace organických materiálů jako jsou vodivé polymery a makromolekuly vyznačující se charakterem polovodičů. Obě metody budou zkoumány z hlediska mechanismů a kvality implantace specifických receptorů do organických materiálů. Dále bude sledováno jejich výsledné rozložení v citlivé vrstvě chemického senzoru například pomocí prvkového mapování energiově disperzní spektroskopie. Takto modifikované chemické senzory budou testovány v atmosférách analytů toxických a výbušných plynů a par a jejich odezvy budou statisticky porovnány s nestructurovanými protějšky.

English: Contemporary experimental chemical sensors based on organic materials are progressive electronic components, but they still suffer from numerous ailments, preventing their use in real applications. A fundamental disadvantage of these chemical sensors is their low selectivity. In practice, these sensors exhibit a highly sensitive response to low concentrations of various gases and vapors, but also they are not able to distinguish between the analyte to be detected and interferents. Therefore, in present time, a number of methods that would overcome these problems is tested. Molecular imprinting or methods targeted by this work - physical and chemical functionalization of sensitive material of chemical sensor belong among the most important ones.

The aim of this work is to systematically investigate methods of physical and chemical functionalization of organic materials (conductive polymers and macromolecules) with character of the semiconductors. Both methods will be studied from the perspective of mechanisms and quality of the specific embedded receptors. Furthermore, their distribution in the sensitive layer of chemical sensor will be observed, using elemental mapping by energy-dispersive spectroscopy. The modified chemical sensors will be tested in the atmospheres of analytes of toxic and explosive gases and vapors, and their responses will be statistically compared with unstructured counterparts.

Elektronová mikroanalýza struktury chemických senzorů toxických plynů a par Electron microanalysis of the structure of chemical sensors

Školitel / Supervisor: Ing. Dušan Kopecký, Ph.D., školitel specialista / Co-supervisor: Doc. Ing. Dr. Martin Vršata

Skenovací elektronová mikroskopie (SEM) a energiově disperzní spektroskopie (EDS) patří mezi dvě základní a nejdůležitější metody elektronové mikroanalýzy. Dohromady vytváří mocný nástroj pro studium nano a mikroobjektů

v prostoru i energiích a spolu s pokročilými metodami počítačového zpracování signálů a obrazů umožňují poodhalit strukturu a složení, případně defekty a znečišťující příměsi v řadě miniaturních zařízení.

Cílem této práce je studium topologie a povrchového složení citlivých vrstev chemických senzorů a jejich vlivu na schopnost senzorů detekovat nízké koncentrace toxických plynů a par. Práce se bude věnovat zejména moderním metodám mapování povrchů a korelaci získaných dat s parametry depozičních procesů. V práci budou využity pokročilé metody zpracování signálů z detektorů sekundárních a zpětně odražených detektorů, analýzy obrazu a kvantitativní a kvalitativní analýzy prvkového složení vzorku.

English: Scanning electron microscopy (SEM) and energy dispersive X-ray spectroscopy (EDX) are the two basic and most important methods of electron microanalysis. Together they create a powerful tool for the study of nano- and micro-objects in space and energy. Along with advanced methods of computer signal and image processing they allow to reveal the structure and composition and also defects and contaminants in numerous miniature devices.

The aim of the work is to study the topology and surface composition of sensitive layers of chemical sensors and their impact on the ability of sensors to detect low concentrations of toxic gases and vapors. The work will focus mainly on modern methods of surface mapping and data will be correlated with the parameters of the deposition processes. The work takes advantage of advanced methods of signal processing from secondary and backscattered detectors, image analysis and quantitative and qualitative analysis of the elemental composition of the sample.

Inteligentní textilie pro detekci chemických bojových látek a jejich simulantů

Smart textiles for detection of chemical warfare agents and their simulants

Školitel / Supervisor: doc. Ing. Dr. Martin Vršata, Školitel specialista / Co-supervisor: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Inteligentní textilie pro detekci plynů představují novou třídu senzorů tvořených substrátem z dielektrické tkaniny (nejčastěji polyester nebo polyamid) a tenkou citlivou vrstvou organického vodiče, jejíž elektrické vlastnosti jsou modulovány přítomností sledovaného plynného analytu. V nedávné době byly syntetizovány tzv. polymerní iontové kapaliny, navržené jako kationtové nebo aniontové vodiče, a při prvních experimentech vykázaly inteligentní textilie z nich připravené dobrou citlivost na bojové chemické látky (sarin) i jejich simulanty (diethylmalonát). Výzkum užití polymerních iontových kapalin v senzorech plynů je ovšem dosud teprve v počátečním stadiu. Přitom inteligentní textilie nacházejí kvůli svým výhodným vlastnostem (schopnost detekovat toxické látky za pokojové teploty, ohebnost substrátu, nízké náklady na přípravu) uplatnění v konceptu tzv. "inteligentního oděvu", tj. oděvu osazeného senzory, a jsou již v současné době využívány armádami a bezpečnostními složkami. Disertační práce se zaměří zejména na přípravu inteligentních textilií, charakterizaci chemického složení a elektrotransportních vlastností vybraných polymerních iontových kapalin a systematický výzkum odezvy vytvořených senzorů na chemické bojové látky i jejich simulanty.

English: Smart textiles for detection of gases represent a new class of sensors. They are composed of dielectric substrate (polyester or polyamide fabric) and a thin layer of organic conductor, whose electric parameters are modulated in the presence of gaseous analyte. In recent years, the so-called Polymer Ionic Liquids (PILs) were developed. The PILs are designed so as to be either cationic or anionic conductors. In preliminary experiments the smart textiles based on them exhibit a good sensitivity to chemical warfare agents (sarin) and the simulants of chemical warfare agents (diethylmalonate). However, the research of applications of PILs in gas sensors is still in initial stage. The smart textiles have several inherent advantages (ability to detect gases even at laboratory temperature, mechanical flexibility, low fabrication costs) and became a part of "smart uniforms", i.e. the uniforms equipped with various sensors, used by army, police and integrated rescue system. This thesis is focused on: preparation of smart textiles, characterization of chemical composition and electrotransport properties of selected PILs, a systematic research of response to chemical warfare agents and their simulants.

Studium intenzifikace netermálních výbojů a jejich použitelnosti pro účely dekontaminace povrchů a kapalin

The Study of Improvement of Non-Thermal Discharges and their Applicability for Decontamination Purposes

Školitel / Supervisor: doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D., školitel specialista / Co-supervisor: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Cílem práce je intenzifikace stávajících netermálních výbojů s ohledem na možnost jejich použití pro účely dekontaminace povrchů a kapalin. Intenzifikací se rozumí dosažení vyšších výkonů výbojů, popřípadě dosažení kvalitativní změny v jejich režimu bez nežádoucích jevů, jakými jsou přechod do jiskry nebo do oblouku, nadměrný ohřev v oblasti výboje atd. Modifikace (intenzifikace) může být obecně provedena například zařazením vhodného prvku do elektrického obvodu výboje, změnou geometrie elektrod, změnou charakteru napájecího napětí výboje nebo ovlivňováním již vytvořeného plazmatu mezi elektrodami výboje. Poslední možnost zahrnuje například dodatečné přivádění proudícího plynu do prostoru mezi elektrodami, působení elektromagnetického pole či ultrazvuku na plazma, atd. Intenzifikovaný výboj bude poté testován pro účely dekontaminace povrchů nebo kapalin. Bude zjišťována zejména jeho dekontaminační účinnost (procentuální úbytek bakterií po expozici výbojem) a energetická výtěžnost dekontaminace (počet umrtných bakterií na jednotku energie přivedené do výboje).

English: The aim of the work is to improve existing non-thermal electrical discharges and to analyze their decontamination properties. The term improvement means to increase the discharge current and power possibly to achieve qualitative change in the discharge regime without an undesirable phenomena such as the transition into the arc or spark discharge, the excessive release of heat in the discharge area etc. In general the improvement of discharges can be made in several ways, e.g. including of suitable component in to the electrical circuit of the discharge, changing of the electrode geometry,

changing of the character of supply voltage or influencing of the created plasma between the discharge electrodes. The last case comprises additional supplying of flowing gas in to the area between electrodes, influencing of the plasma by electromagnetic field, ultrasound waves etc. Consecutively improved electrical discharge will be analyzed for surface or liquid decontamination purposes. There will be found out decontamination efficiency (percentage decrease of bacteria after discharge exposition) and energy yield of decontamination (the ratio of quantity of deactivated bacteria and the energy delivered into the process).

Možnosti aplikace baktericidních vlastností korónového výboje **The Possibilities of Application of the Corona Discharge Bactericidal Effects**

Školitel / Supervisor: doc.Ing.Vladimír Scholtz, Ph.D.,

Školitel specialista / Co-supervisor: doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc., Ing. Josef Khun, Ph.D.

Nízkoteplotní plazma, vzhledem ke svým baktericidním vlastnostem, může být vhodnou náhradou konvenčních sterilizačních metod. Práce je zaměřena především na korónový výboj a jeho možné praktické aplikace pro dekontaminaci až sterilizaci povrchů nebo kapalin. Výsledky by mohly být využitelné pravděpodobně v laboratorní praxi. Zároveň je tady prostor pro výzkum vlivu baktericidního agens korónového výboje na různé typy bakterií, jejich spór, kvasinek a případně i jiných mikroorganismů.

English: Low temperature plasma is looking like a possible alternative to the common sterilization methods. Scope of this work is the corona discharge and its possible practical applications for the decontamination of surfaces and liquids. Results may be employed in laboratory practice. It is possible to combine this work with the investigation of bactericidal effects of corona discharge to the bacteria, bacterial spores, yeast or other microorganisms.

Počítačové modelování nízkoteplotního plazmatu a elektrických výbojů **Computer Modelling of Low-Temperature Plasma and Electrical Discharges**

Školitel / Supervisor: doc.Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D., školitel specialista / Co-supervisor: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Předmětem práce je počítačové modelování nízkoteplotního plazmatu, především v souvislosti s jeho generováním v elektrických výbojích, což by mělo přispět k objasnění chemických reakcí ve výbojích a jejich prostorového rozložení. Práce předpokládá seznámení se s problematikou fyziky plazmatu, počítačovým modelováním, výběr vhodné resp. vhodných metod k modelování vybraného problému a kontrolu s experimentem. Práci je možné spojit i s výzkumem baktericidních vlastností nízkoteplotního plazmatu a případně modelovat interakci plazmatu s organickými strukturami.

English: Scope of this work is the computer modelling of low temperature plasma in electrical discharges. It may help to clarify the plasma-chemical reactions in discharges and the area distribution of generated particles. Work deals with the issue of plasma physics, computer modelling, possible method for the modelling of selected problem and comparison with the experiment. It is possible to combine this work with the investigation of bactericidal effects of low-temperature plasma or the interaction with organic structures.