

3. Česko-Slovenská studentská vědecká konference ve fyzice

Matematicko-fyzikální fakulta



Univerzity Karlovy v Praze

17. - 18. května 2012

Abstrakty příspěvků

EXAKTNÉ RIEŠENIE DEKOROVANÉHO ISINGOVHO MODELU SO SPINOVOU-FONÓNOVOU INTERAKCIOU

Bc.Matúš Rebič, Doc.RNDr.Jozef Strečka, PhD.

Katedra teoretickej fyziky a astrofyziky, Prírodovedecká fakulta,
Univerzita P. J. Šafárika, Park Angelinum 9, 040 01 Košice

rebicmatus@gmail.com

Táto práca je inšpirovaná exaktným riešením Isingovho modelu so spinom $\frac{1}{2}$ a spinovou-fonónovou interakciou na dekorovanej štvorcovej mriežke s prípustnými mriežkovými vibráciami dekorujúcich atómov, ktorý bol študovaný v práci Strečku, Rojas a de Souza pomocou dekoračno-iteračnej transformácie a harmonickej aproximácie [1]. Zovšeobecnilí sme takýto postup pre Isingov model so zmiešanými spinmi $\frac{1}{2}$ -S a prípustnými mriežkovými vibráciami dekorujúcich atómov so spinom S, pričom veľkosť spinu S dekorujúcich atómov môže nadobúdať ľubovoľné hodnoty. Z mapovacej korešpondencie s jednoduchým Isingovým modelom so spinom $\frac{1}{2}$ na štvorcovej mriežke boli odvodené presné analytické výsledky pre partičnú funkciu, celkovú magnetizáciu aj magnetizáciu jednotlivých podmriežok, vnútornú energiu a smerodajnú odchýlku. Uvažovaním konkrétneho spinového systému s dekorujúcimi spinmi veľkosti $S = 1$ sme preskúmali fázový diagram a teplotné závislosti celkovej magnetizácie, podmriežkových magnetizácií, smerodajnej odchýlky a tepelnej kapacity. Ukázali sme, že uvažovaný spinový model sa môže nachádzať v dvoch fázach, ktoré sú navzájom oddelené v základnom stave fázovým prechodom prvého druhu a pri konečných (nenulových) teplotách krivkou fázového prechodu druhého druhu. Taktiež boli preštudované teplotné závislosti smerodajnej odchýlky a tepelnej kapacity pri rôznych hodnotách interakčných parametrov. Preštudovanie tepelnej kapacity prinieslo zaujímavé zistenia, ako výskyt troch oblých Schottkyho maxím pre interačné parametre z blízkeho okolia fázového prechodu medzi magneticky usporiadanou a neusporiadanou fázou.

References:

- 1) J.Strečka, O.Rojas, and S.M de Souza, Phys. Lett. A 376 (2012) 197.

Selektivne zriedený Isingov antiferomagnet na trojuholníkovej a šesťuholníkovej mriežke

Bc. Michal Borovský

Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika,

Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika

Úvod

Je známe, že nezriedený Isingov model s antiferomagnetickou interakciou medzi najbližšími susedmi na trojuholníkovej mriežke nevykazuje žiadne dlhodosahové usporiadanie kvôli prítomnosti vysokého stupňa frustrácie [1, 2].

Táto degenerácia môže byť sňatá jednak globálne, ak systém vložíme do vonkajšieho magnetického poľa [3-5], alebo lokálne vkladáním zmrazených magnetických vakancií [6, 7], poprípade súčasným pôsobením týchto dvoch vplyvov [8, 9].

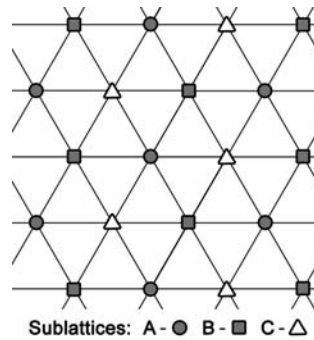
Kaya a Berker [10] ukázali, že ak je náhodne zriedená len jedna podmriežka z troch na trojuholníkovej mriežke, potom sa môže prejaviť dlhodosahové usporiadanie na zvyšných dvoch podmriežkach už pri relatívne nízkej koncentrácii vakancií.

Cieľom našej súčasnej štúdie je rozšíriť výskum Kaya a Berkeho [10] za účelom vytvoriť trojrozmerný fázový diagram systému s dvoma podmriežkami súčasne zriedenými, ale s rôznymi pravdepodobnosťami. Keďže koncentrácie magnetických uzlov zriedených podmriežok predstavujú dva nezávislé parametre, ktoré sú schopné kontrolovať stupeň frustrácie v celom systéme, môžeme očakávať netriviálne správanie zobrazujúce kvalitatívne odlišnosti v rôznych oblastiach priestoru parametrov. Navyše, ak jedna podmriežka je úplne zriedená, mriežka sa redukuje na šesťuholníkovú, a tak môžeme získať fázový diagram selektivne zriedeného Isingovho antiferomagnetu na šesťuholníkovej mriežke.

Teória

Aby sme zahrnuli korelačné efekty zodpovedné za jav geometrickej frustrácie, rozdelíme systém na súbor troch podmriežok A, B a C (viď obr. 1).

Na štúdium kritického správania a magnetizácií základného stavu nášho systému použijeme aparát teórie efektívneho poľa s koreláciami (EFT), pomocou ktorého dospejeme k sústave troch previazaných polynomiálnych rovníc pre podmriežkové magnetizácie na



Obr. 1: Rozdelenie trojuholníkovej mriežky na tri podmriežky A, B a C. Tieňované symboly označujú prípad selektívneho zriedenia, kedy dve podmriežky sú zriedené, t.j. $\mathbf{p} = (p_A, p_B, 1)$.

uzol v tvare

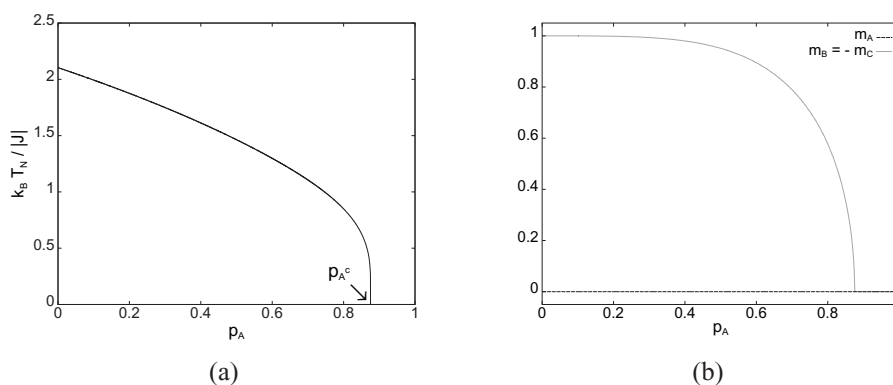
$$\begin{aligned} m_A &= p_A (a_B + bm_B)^3 (a_C + bm_C)^3 \tanh(x) |_{x=0}, \\ m_B &= p_B (a_A + bm_A)^3 (a_C + bm_C)^3 \tanh(x) |_{x=0}, \\ m_C &= p_C (a_A + bm_A)^3 (a_B + bm_B)^3 \tanh(x) |_{x=0}, \end{aligned}$$

kde $a_X = 1 - p_X + p_X \cosh(\beta JD)$ pre $X = A, B$ alebo C , $b = \sinh(\beta JD)$, p_X je koncentrácia magnetických iónov podmriežky X , $\beta = 1/k_B T$, J je konštanta výmennej párovej interakcie, $D = \partial/\partial x$.

Využívajúc fakt, že v blízkosti fázového prechodu druhého druhu sú podmriežkové magnetizácie m_X ($X = A, B$ alebo C) veľmi malé, túto sústavu rovníc môžeme rozvinúť a linearizovať, čo povedie k systému homogénnych lineárnych rovníc, a potom kritickú teplotu vieme stanoviť nájdením jej netriviálneho riešenia, t.j. riešením sekulárnej rovnice.

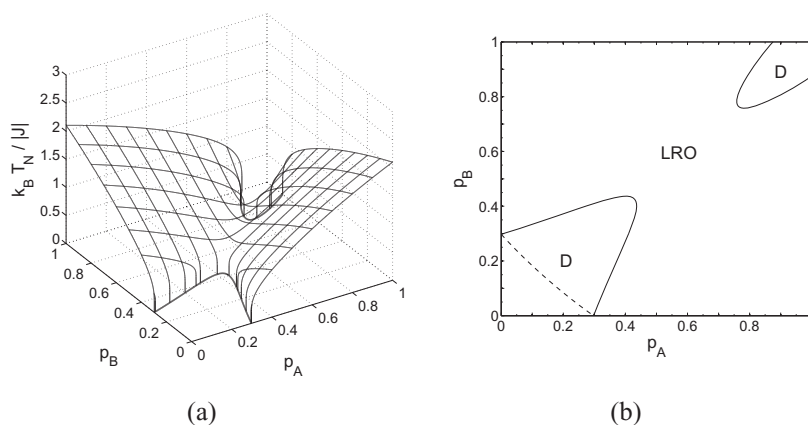
Zhrnutie výsledkov

V ďalšom budeme uvažovať selektívne zriedený systém, do ktorého budeme vkladat' magnetické vakancie len na jednu podmriežku, povedzme A. Výsledný fázový diagram je vykreslený na obr. 2(a), v ktorom plocha pod krivkou predstavuje fázu dlohodahového usporiadania (LRO - long-range order). V limitnom prípade šesťuholníkovej mriežky ($p_A = 0$) kritická teplota dosahuje maximum s hodnotou $k_B T_N/|J| = 2.1038$, čo je v súlade s predchádzajúcimi výsledkami [11]. Pod určitou prahovou koncentráciou $p_A^c = 0.8753$, nezriedené podmriežky vykazujú LRO s nenulovými magnetizáciami $m_B = -m_C$, ktoré nie sú saturované, ak $T \rightarrow 0$ a $p_A > 0$. Na druhej strane, magnetizácia zriedenej podmriežky m_A ostáva nulová pri ľubovoľnej koncentrácii. Popísané správanie je demonštrované na obr. 2(b).



Obr. 2: (a) Teplota prechodu ako funkcia koncentrácie p_A pre $\mathbf{p} = (p_A, 1, 1)$. (b) Podmriežkové magnetizácie pri nulovej teplote pre $\mathbf{p} = (p_A, 1, 1)$.

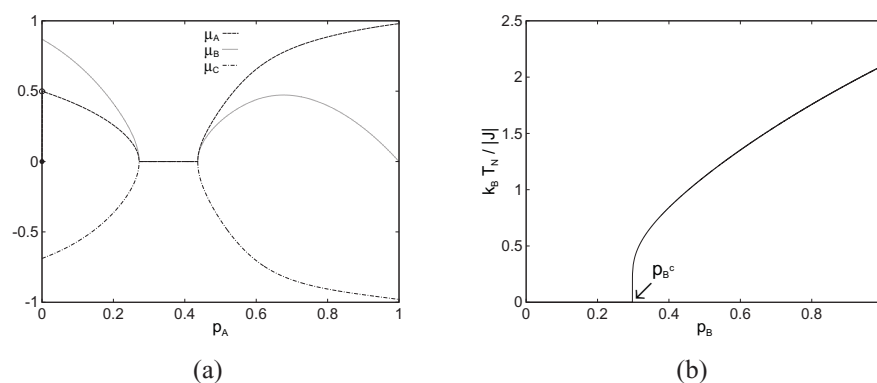
Teraz sa pozrime ako sa táto situácia zmení, ak rozšírime zriedenie na dve podmriežky, t.j. ak $\mathbf{p} = (p_A, p_B, 1)$, kde $0 \leq p_A, p_B \leq 1$. Tomuto prípadu odpovedajúci fázový diagram je znázornený na obr. 3(a). V porovnaní s predchádzajúcim špeciálnym prípadom, ak zriedujeme aj podmriežku B pozorujeme celkový pokles kritických teplôt, až po situáciu, kedy je $p_A = p_B$. Riešením sekulárnej rovnice v limite nulovej teploty, vieme získať fázový diagram základného stavu, ktorý je vykreslený na obr. 3(b). Pozorujeme, že fáza dlhodobého usporiadania je prerušená dvoma oblasťami neusporiadania. Prvá



Obr. 3: (a) Teplota prechodu ako funkcia koncentrácií p_A a p_B pre $\mathbf{p} = (p_A, p_B, 1)$. Hrubými čiarami je zvýraznená limita pre nulovú teplotu. (b) Fázový diagram základného stavu v rovine koncentrácií $p_A - p_B$ pre $\mathbf{p} = (p_A, p_B, 1)$. LRO a D znamenajú dlhodobé usporiadanie (long-range ordered) a neusporiadanú (disordered) fázu, v uvedenom poradí. Čiarkovaná krivka zodpovedá nefrustrovanému feromagnetickému prípadu.

menšia oblasť, vzniká pri vysokých podmriežkových koncentráciách ako dôsledok vysokej frustrácie, kým pri nízkych koncentráciách je neusporiadanie spôsobené neprítomnosťou perkoláčného klastra a zvýraznené efektom frustrácie. Fázovou hranicou nefrustrovaného feromagnetického systému demonštrujeme efekt frustrácie na usporiadanie systému.

Selektivně zriedenie vplýva na stupeň frustrácie, čo vedie k niekoľkým špecifickým javom, ako reentrantné správanie dlhodosahového usporiadania alebo nesaturovaným podmriežkovým magnetizáciám pri nulovej teplote (viď obr. 4(a)). Obr. 4(b) predstavuje fázový diagram selektivne zriedeného systému na šesťuholníkovej mriežke, kde sme stanovili hodnotu perkolačného prahu $p_B^c = 0.2976$, t.j. kritickej koncentrácie, pod ktorou dlhodosahové usporiadanie nemôže existovať kvôli chýbajúcemu perkolačnému klastru spinov.



Obr. 4: (a) Podmriežkové magnetizácie na spin $\mu_X = m_X/p_X$, kde $X = A, B$ alebo C , pri nulovej teplote pre $p_B = 0.4$. (b) Teplota prechodu ako funkcia koncentrácie p_B pre $\mathbf{p} = (0, p_B, 1)$. Táto závislosť predstavuje fázový diagram selektivne zriedeného antiferomagnetu na šesťuholníkovej mriežke.

Literatúra

- [1] G.H. Wannier, Phys. Rev., **79** (1950), 357.
- [2] M. Houtappel, Physica, **16** (1950), 425.
- [3] B.D. Metcalf, Phys. Lett., **45A** (1973), 1.
- [4] M. Schick, J.S. Walker, M. Wortis, Phys. Rev. B, **16** (1977), 2205.
- [5] R.R. Netz, A.N. Berker, Phys. Rev. Lett., **66** (1991), 377.
- [6] G.S. Grest, E.F. Gabl, Phys. Rev. Lett., **43** (1979), 1182.
- [7] C.Z. Andérico, J.F. Fernández, T.S.J. Streit, Phys. Rev. B, **26** (1982), 3824.
- [8] X. Yao, Solid State Communications, **150** (2010), 160.
- [9] M. Žukovič, M. Borovský, A. Bobák, Physics Letters A, **374** (2010), 4260.
- [10] H. Kaya, A.N. Berker, Phys. Rev. E, **62** (2000), R1469.
- [11] G. B. Taggart, I. P. Fittipaldi, Phys. Rev. B, **25** (1982), 7026.

Princíp neurčitosti v kvantovej mechanike v priestore s nekomutatívnou geometriou

Kováčik Samuel ^{1,*}

1. *Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky, FMFI, Univerzita Komenského
Bratislava*

* samuel.kovacik@gmail.com

V predkladanej práci skúmame fyzikálne aspekty kvantovej mechaniky s nekomutatívnou geometriou. Nekomutatívna geometria, odpovedajúca „rozmazaniu“ priestoru na istej (malej) škále je motivovaná úvahou z kvantovej teórie gravitácie a sľubuje o.i. odstraňovanie UV/IR divergencií v QFT. Inšpirovaný štandardnou kvantovou mechanikou a jej vzťahom

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$$

odpovedajúcim deformácii fázového priestoru zavádzame priestor s nekomutatívnou geometriou pomocou vzťahu (λ je konštanta nekomutatívnosti)

$$[\check{X}^i, \check{X}^j] = 2i\lambda \varepsilon^{ijk} \check{X}^k$$

Číselné súradnice takýto vzťah zjavne nemôžu spĺňať, preto ich reprezentujeme pomocou dvoch sád bozónových operátorov spĺňajúcich bežné vzťahy.

$$[\check{a}_\alpha, \check{a}_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}, [\check{a}_\alpha, \check{a}_\beta] = [\check{a}_\alpha^\dagger, \check{a}_\beta^\dagger] = 0$$

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{(\check{a}_1^\dagger)^{n_1} (\check{a}_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |0, 0\rangle$$

$$\hat{X}^j = \lambda \hat{a}^\dagger \sigma^j \hat{a}$$

Po zadenívaní základných objektov (súradnice, Hilbertov priestor stavov) zadeníme v práci niektoré významné operátory (napríklad voľný Hamiltonián). Pomocou nich dokážeme zadenovať operátor rýchlosti ako

$$\hat{V}^j = -i[\hat{X}^j, \hat{H}]$$

Následně v práci stručně preskúmáme niektoré jeho základne vlastnosti. Klíčovou část práce potom tvorí výpočet principu neurčitosti, v ktorom korekcia k Leibnizovmu pravidlu spôsobí korekciu voči klasickému principu neurčitosti :

$$\mathcal{S}([\hat{V}^i, \hat{X}^j])\psi = \delta^{ij}(1 - \lambda^2 \hat{H}_0)\psi$$

DYNAMIKA MULTIŠKÁLOVÝCH KORELÁCIÍ VO FINANČNÝCH ČASOVÝCH RADOCH

Stanislav Hrivňak*, doc. Milan Žukovič, PhD. (konzultant)

Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach

Katedra teoretickej fyziky a astrofyziky

* stano.hrivnak@gmail.com

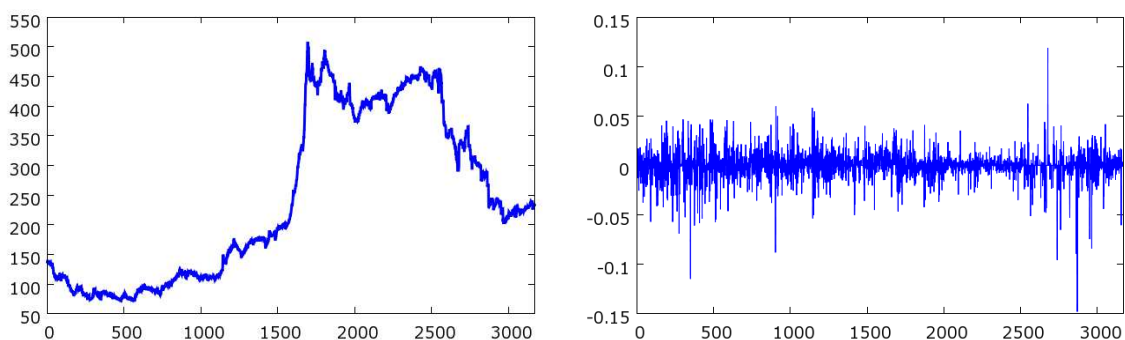
Finančné trhy sú komplexné systémy, ktoré vykazujú isté charakteristiky podobné niektorým fyzikálnym systémom, modelujúcim napr. dynamiku kvapalín alebo turbulencie.

Idealizované systémy sú už od nepamäti predmetom štúdia fyzikálnych vied a boli kľúčové pri formovaní fyziky ako vednej disciplíny. Fyzici používajú tieto abstrakcie na vytváranie veľkolepých teórií, no nezabúdajú dodať, že idealizované systémy sú iba priblížením skutočnosti a že správanie reálnych systémov bude vždy sprevádzané odchýlkami od idealizovaných systémov. [1] S podobnými priblíženiami sa stretávame aj vo finančných systémoch. Samotný pojem efektívneho trhu, ktorý hrá kľúčovú úlohu v tejto práci, pomenúva idealizovaný systém. Trh nazývame efektívnym, ak každá pre trh prístupná informácia je okamžite premietnutá do novej ceny obchodovateľnej akcie. [2] Táto definícia následne vedie k záveru, že zmeny cien sú vo svojej podstate nepredikovateľné, rešpektujúce koncept náhodného kráčania [3]. Za predpokladu efektívneho trhu možno vytvárať teórie a následne ich testovať empirickými štúdiami.

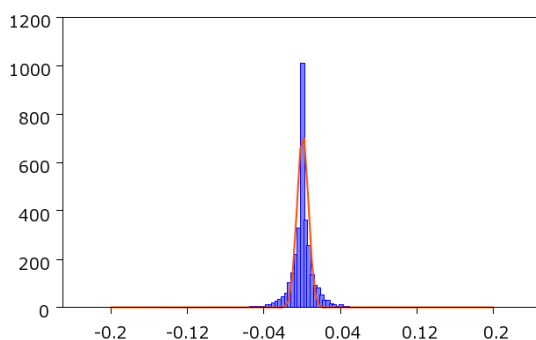
Nedávne empirické štúdie finančných časových radov však preukázali istý stupeň odchýlky výnosov od konceptu náhodného kráčania, t.j. od slabej formy teórie efektívneho trhu (TET). [4]. Zistilo sa však, že trhová efektivita sa mení s časom a obdobia neefektivity sú vo svojom výskyte aj trvaní náhodné veličiny, čo výrazne sťažuje ich využitie na predikčné účely. [5].

Cieľom tejto štúdie je demonštrovať, že reálne dáta vykazujú odchýlky od idealizovanej predstavy efektívneho trhu, tak ako reálne fyzikálne komplexné systémy vykazujú odchýlky od tých ideálnych. Konkrétne sa táto práca zaoberá štúdiom dynamiky lineárnych a nelineárnych závislostí vo finančnom časovom rade výnosov SAX indexu Slovenska použitím štatistického testu navrhnutého Hinichom v klzavom okne na rôznych škálach, konkrétne dňových, týždňových a mesačných.

Štúdium korelácií bolo prevedené na dátach SAX indexu počnúc 16.3.1998 až do 16.3.2011 (13 rokov), t.j. celkovo $N = 3170$ pozorovaní. Boli použité denné hodnoty s výnimkou víkendov, kedy sa tento index nevypočítava. Na obr. 1 a 2 je znázornený časový vývoj SAX

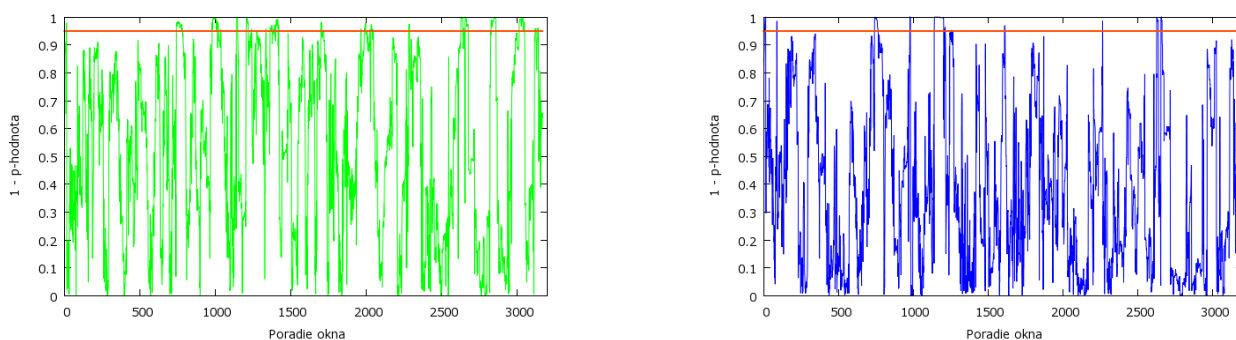


Obr.1. Časový vývoj SAX indexu (vľavo) a logaritmických výnosov (vpravo).



Obr. 2. Histogram logaritmických výnosov s fitom normálneho rozdelenia (červená farba) indexu, logaritmických výnosov ako aj ich histogram.

Hodnoty korelácií a bikorelácií, ktoré slúžia na odhad trhovej efektivity, neboli v čase konštantné a ich priebeh sme zachytili použitím klzavého okna. Časový vývoj $(1-p)$ hodnoty korelácií a bikorelácií Hinichovho štatistického testu [6] pre dňovú škálu zaznamenáva obr. 3. Okná, ktoré vykazujú štatisticky významné korelácie alebo bikorelácie (ich $(1-p)$ -hodnota je v grafe nad červenou čiarou) budeme nazývať významnými.

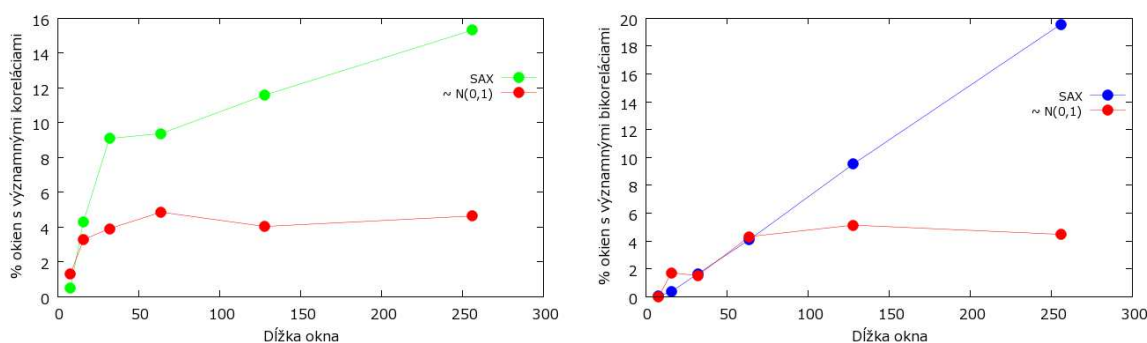


Obr.

Obr. 3. Korelácie (vľavo) a bikorelácie (vpravo) na dňovej škále reprezentované $(1-p)$ -hodnotou v jednotlivých oknách. Čiarou $1-p = 0,95$ je znázornená hraničná podmienka pre posúdenie významnosti okna. Dĺžka okna je $n = 64$.

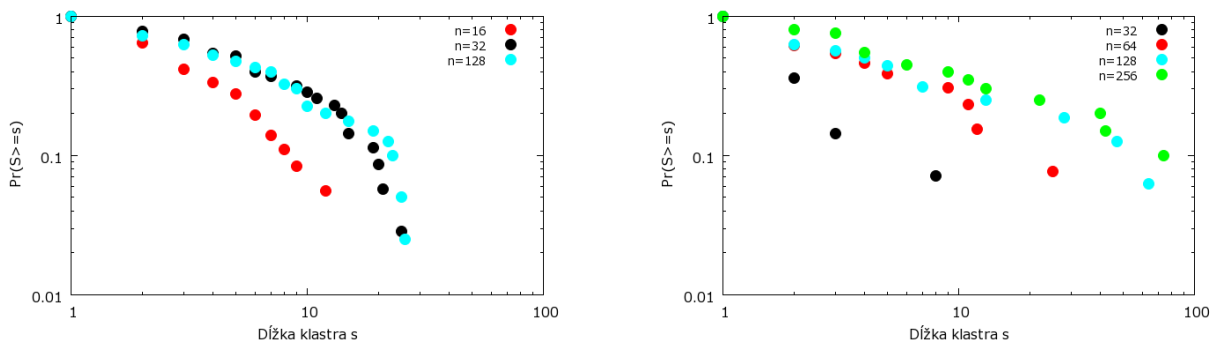
Na obr. 4 sú uvedené percentuálne počty okien s významnými koreláciami a bikoreláciami v závislosti na dĺžke okna. Lim a kol. [7, 8] ako ďalší indikátor efektívnosti trhu považujú práve nezávislosť percentuálneho počtu významných okien od použitej dĺžky okna n . Na

základe tohto princípu teda je možné hovoriť o našom skúmanom trhu ako o neefektívnom.



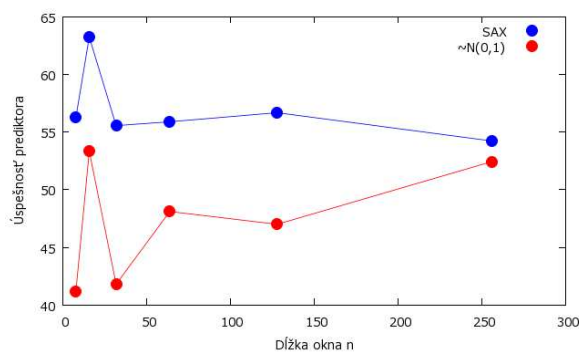
Obr. 4. Závislosť percenta okien s významnými koreláciami (vľavo) a bikoreláciami (vpravo) od dĺžky okna a porovnanie s náhodnými dátami generovanými z rozdelenia $N(0,1)$.

Z výsledkov na obr. 3. je zrejмый výskyt zoskupení, klastrov významných okien. Preto by bolo zaujímavé skúmať veľkosti a početnosť týchto klastrov pre rôzne dĺžky okna, čo zaznamenáva obr. 5. Miestami je badateľné správanie sa podľa mocninového zákona.



Obr. 5. Kumulatívna distribúcia klastrov okien s významnými koreláciami (vľavo) a bikoreláciami (vpravo) pre rôzne dĺžky okna n .

Obdobia výskytu okien s významnými koreláciami je možné použiť na predikciu zmeny SAX indexu použitím jednoduchého prediktora založeného na koreláciách [5], predpovedajúceho rast alebo pokles hodnoty SAX indexu po výskyte významných okien. Testovaná úspešnosť nášho prediktora v závislosti od dĺžky okna je na obr. 6.



Obr. 6. Závislosť priemernej úspešnosti predikcie od dĺžky okna n pre SAX index a náhodné dáta z rozdelenia $N(0,1)$.

Z vyššie uvedených poznatkov možno vyvodit' záver, že skúmaný trh vykazuje odchýlky od

efektívneho správania. Aj keď zistené krátke obdobia neefektivity majú prechodný a nestály charakter, sú do istej miery použiteľné na predikčné účely.

LITERATÚRA:

- [1] R. N. MANTEGNA, H. E. STANLEY. 2000: Introduction to Econophysics Correlations and Complexity in Finance, Cambridge University Press, 144 s., ISBN 0 521 62008 2.
- [2] E. F. FAMA. 1970, Efficient Capital Markets: A Review of Theory and Empirical Work, In *J. Finance*. no. 25, p. 383-417.
- [3] P. A. SAMUELSON. 1965, Proof that Properly Anticipated Prices Fluctuate Randomly, In *Industrial Management Rev.*, no. 6, p. 41-45.
- [4] C. EOM - S. CHOI - G. OH - W.S. YUNG. 2008, In *Physica A*, no. 387, p. 4630.
- [5] A. SERLETIS - A. G. MALLIARIS - M. J. HINICH - P. GOGAS, Episodic nonlinearity in leading global currencies, In *Open Econ Rev.*, DOI:10.1007/s11079-010-9194-9.
- [6] M. J. HINICH. 1996, In *J Nonparametric Statist*, no. 6, p. 205.
- [7] K. P. LIM, R. D. BROOKS, J. H. KIM. 2008, In *International Review of Financial Analysis* no. 17, p. 571.
- [8] K. P. LIM - R. D. BROOKS. 2009, In *Chaos, Solitons and Fractals*, no. 40,p. 1271.

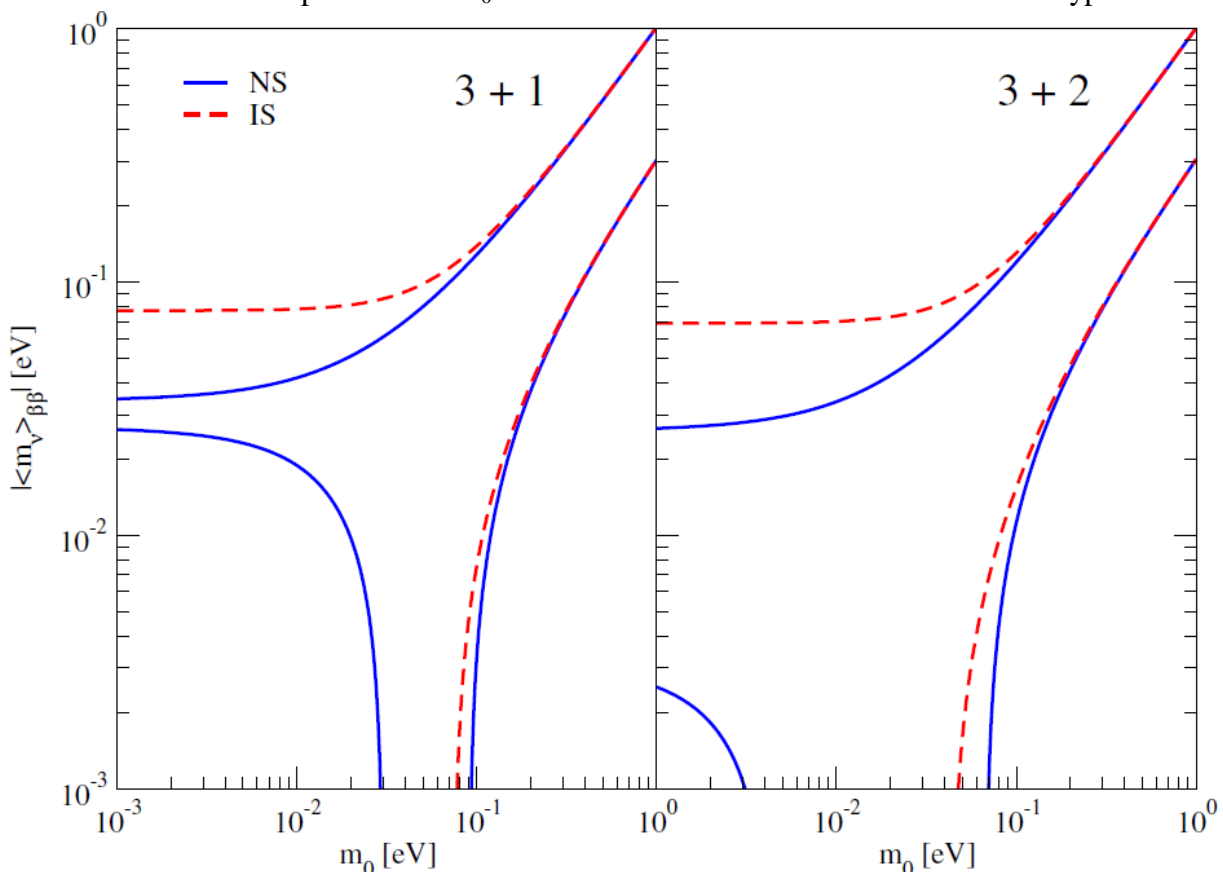
ABSOLUTE SCALE OF NEUTRINO MASS AND STERILE NEUTRINOS

Babič_Andrej*, Šimkovic_Fedor¹

1. Department of Nuclear Physics and Biophysics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University in Bratislava

* andrejbabic@centrum.sk

Neutrino is an elementary particle, basic properties of which are still unknown. Many fundamental questions concerning neutrino mass, particle-antiparticle relationship or number of neutrino types remain unanswered. In standard model neutrino appears in 3 flavours as electron ν_e , muon ν_μ and tau ν_τ neutrino and interacts with other particles via weak interaction. Results from LSND (1998) and MiniBooNE (2007) experiments and reactor antineutrino anomaly (2011) [1], however, suggest possible existence of another 1 or 2 types of neutrinos. Since these neutrinos cannot interact via weak force, they are called *sterile neutrinos*. In our article we investigate theoretical boundaries of several physical quantities describing absolute scale of neutrino mass in 3, 3 + 1 and 3 + 2 neutrino types case [2], [3], as follows from available experimental data [4], [5], [6], [7]. One of the most important results is the theoretical constraint on modulus of *effective Majorana neutrino mass* $|\langle m_\nu \rangle_{\beta\beta}|$ with respect to the so-called free parameter m_0 in 3 + 1 and 3 + 2 neutrino types case.



In the future, these results could be crucial in our attempts to determine the absolute scale of

neutrino mass and constrain possible values of Majorana CP violating phases (if neutrino proves itself to be a Majorana particle).

References:

- 1) G. Mention, M. Fechner, T. Lasserre, T. A. Mueller, D. Lhuillier, M. Cribier and A. Letourneau, The reactor antineutrino anomaly, PRD (2011)
- 2) S. M. Bilenky, A. Faessler, W. Potzel and F. Šimkovic, Neutrinoless double-beta decay and seesaw mechanism, EPJ (2011)
- 3) S. Pascoli, S. T. Petcov and T. Schwetz, The absolute neutrino mass scale, neutrino mass spectrum, Majorana CP-violation and neutrinoless double-beta decay, SISSA (2005)
- 4) S. A. Thomas, F. B. Abdalla and O. Lahav, Upper bound of 0.28 eV on neutrino masses from the largest photometric redshift survey, PRL (2010)
- 5) A. Gando, Constraints on θ_{13} from a three-flavor oscillation analysis of reactor antineutrinos at KamLAND, PRD (2011)
- 6) A. Habig, A brief review of MINOS neutrino oscillation results, MPL (2010)
- 7) J. Kopp, M. Maltoni and T. Schwetz, Are there sterile neutrinos at the eV scale?, PRL (2011)

ONESKORENÉ ŠTIEPENIE PO BETA PREMENE ¹⁷⁸⁻¹⁸²TL A ²⁰²FR

Andel Boris*

školiťel: Antalic Stanislav

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

* boris.andel@gmail.com

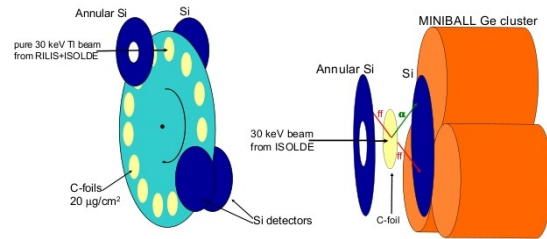
Práca sa zaoberá oneskoreným štiepením po beta premene (β DF – beta delayed fission). Je to proces, pri ktorom najskôr prebehne beta premena na jadro v excitovanom stave. Následne nastáva štiepenie dcérskeho jadra za predpokladu, že energia excitovaného stavu je porovnateľná alebo väčšia, ako výška štiepnej bariéry. Procesu štiepenia konkuruje deexcitácia pomocou vyžiarenia gama kvánt. Základným kritériom na odhadnutie, či možno očakávať oneskorené štiepenie po beta premene je, aby Q_β hodnota (energia beta premeny) bola porovnateľná alebo väčšia, ako výška štiepnej bariéry B_f . Na základe tohto kritéria možno predpokladať výskyt β DF v oblasti veľmi ťažkých jadier, pretože majú nízke štiepne bariéry a v oblasti ďaleko od oblasti beta stability, vďaka veľkej hodnote Q_β . Experimentálne možno určiť $P_{\beta DF}$ ako podiel počtu β DF a počtu β premien [1]:
$$P_{\beta DF} = \frac{N_{\beta DF}}{N_\beta} .$$

β DF umožňuje štúdium štiepných vlastností ako sú hmotnostná distribúcia a kinetická energia fragmentov, výška a štruktúra štiepných bariér, pravdepodobnosti štiepenia, gama deexcitácie a neutrónovej emisie. Rozširuje množstvo nuklidov, u ktorých možno pozorovať nízkoenergetické štiepenie, teda štiepenie z nízko položených excitovaných hladín [1]. Vďaka tomu sa tu môžu významne prejavovať vrstvomé efekty. Korekcie vyplývajúce z vrstvomých efektov majú veľkosť do niekoľkých MeV. Pri štiepení z excitovaných hladín s energiou porovnateľnou s výškou štiepnej bariéry môžu mať korekcie v štiepných fragmentoch výrazný vplyv na hmotnostnú distribúciu fragmentov. Naopak pri štiepení dodaním oveľa väčšej energie, než je výška štiepnej bariéry, sa tieto efekty strácajú [2].

β DF má vplyv na r-proces, ktorý je jedným z procesov nukleosyntézy. Je to rýchly záchyt neutrónov a dochádza k nemu, ak je jadro v tak silnom neutrónovom toku, že doba života vzhľadom na beta premenu je výrazne väčšia, než doba medzi záchyтом dvoch neutrónov. Predpokladá sa, že r-proces je zodpovedný za produkciu približne polovice jadier ťažších ako železo [3]. Navyše, r-procesom sú vytvárané všetky aktinoidy [1]. Na r – proces vplýva β DF spolu so spontánnym a neutrónmi indukovaným štiepením. Rozštiepením jadra sa zabráni vzniku ťažšieho jadra, a teda štiepenie ukončuje r-proces. Navyše takto z jadra z oblasti transuránov vzniknú dva ľahšie fragmenty z oblasti $A \approx 130$, ktoré môžu opäť vstúpiť do r-procesu a premieňať sa na ťažšie jadrá, čo sa nazýva štiepnou recykláciou. Takýmto spôsobom dochádza k zmene výťažkov oproti stavu bez štiepenia [4].

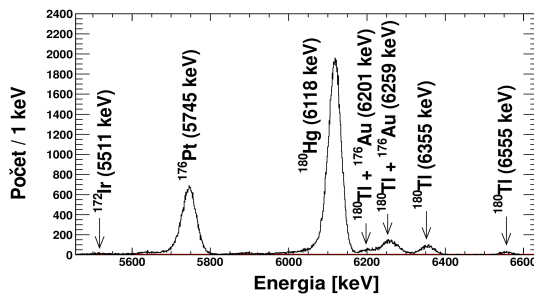
V našej práci sme analyzovali dáta z experimentu, ktorý sa uskutočnil na zariadení ISOLDE v CERNe. Určené je na tvorbu širokej škály rádioaktívnych zväzkov a ich štúdium. Dosahuje sa vysoká čistota zväzkov a v mnohých prípadoch najvyššie intenzity na svete. ISOLDE je schopné produkovať čisté zväzky viac než 70 prvkov ($Z = 2$ až 88) a ich viac ako 700 izotopov s intenzitami od 1 po viac ako 10^{10} iónov za sekundu. Prebieha tu výskum v rôznych oblastiach ako atómová a jadrová fyzika, jadrová astrofyzika, fyzika tuhých látok a materiálov a biomedicínsky výskum [5].

V detekčnom systéme experimentu prechádza zväzok iónov urýchlených na 30 keV otvorom v prstencovom kremíkovom detektore a je implantovaný do uhlíkovej fólie s plošnou hmotnosťou $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ (obr. 1). Po oboch stranách fólie sú umiestnené Si – detektory na detekciu alfa častíc a štípných fragmentov. V jednom z detektorov je spomínaný otvor na prechod iónového zväzku. Celková detekčná účinnosť pri registrácii α častíc alebo fragmentov je 66 %. Na meranie gama kvánt sa v detekčnom systéme nachádza zoskupenie troch Ge – detektorov (MINIBALL Ge cluster) a planárny Ge – detektor [6], [7].

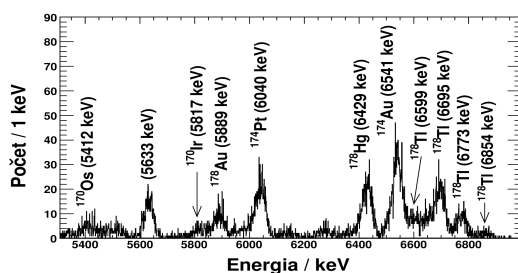


Obr. 1: Detekčný systém. V ľavej strane obrázku je pohľad na otočné koleso s uhlíkovými fóliami, v pravej časti je približený pohľad na rozloženie detektorov na implantačnej pozícii [7].

Uhlíková fólia je umiestnená na rotačnom kolese, na ktorom je dohromady 10 takýchto fólií. Otočením kolesa o 144° sa fólia presunie z implantačnej pozície do rozpadovej pozície, kde je opäť dvojica kremíkových detektorov. Použitie rotačného kolesa s viacerými fóliami umožňuje jednoduchý presun naaktívovanej fólie mimo detektorov a uskutočnenie ďalšieho merania s novou fóliou [7].



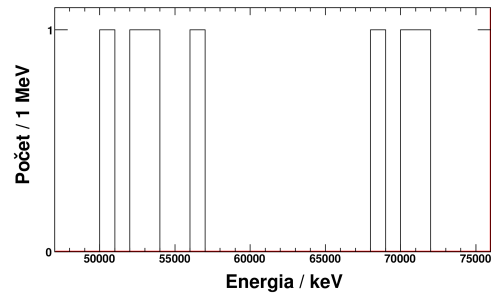
Obr. 2: Alfa spektrum merania ^{180}Tl .



Obr. 3: Alfa spektrum merania ^{178}Tl .

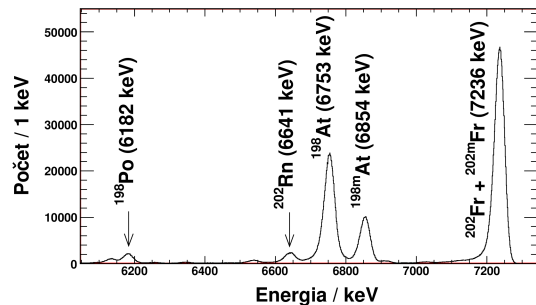
Prebehli postupne merania s priamou produkciou štyroch rôznych izotopov: $^{178}, ^{180}, ^{182}\text{Tl}$ a ^{202}Fr . V prípade izotopu ^{180}Tl (obr. 2) išlo o kontrolné meranie, experiment zameraný na βDF ^{180}Tl prebehol už skôr [6]. V našom experimente bolo zaznamenaných $N_{\beta\text{DF}} = 13$ štípení ^{180}Hg , ktorá vzniká β^+/ϵ premenou ^{180}Tl . S použitím známeho vetviaceho pomeru pre α premenu ^{180}Hg $b_\alpha(^{180}\text{Hg}) = 48(2)\%$ [8] sme získali pravdepodobnosť βDF , $P_{\beta\text{DF}}(^{180}\text{Tl}) = (3,9 \pm 1,1) \times 10^{-5}$. Táto hodnota je v súlade s predošlým meraním $P_{\beta\text{DF}}(^{180}\text{Tl}) = (3,6 \pm 0,7) \times 10^{-5}$ [6]. V α spektre (obr. 2) sme identifikovali niektoré produkty premeny a určili vetviace pomery α premeny izotopov ^{180}Tl , ^{176}Pt a limit vetviaceho pomeru pre ^{172}Ir .

Alfa spektrum z merania s priamou produkciou izotopu ^{178}Tl je na obr. 3. Pozorovaných bolo 7 štípných fragmentov ^{178}Hg , ktorá je produktom β^+/ε premeny ^{178}Tl . Spektrum štípných fragmentov je na obr. 4. Pretože na implantačnej pozícii (obr. 1) bol len jeden detektor, počet štípných fragmentov je rovný počtu zaznamenaných štípení. Pravdepodobnosť βDF sme určili s využitím známeho vetviaceho pomeru α premeny $b_\alpha(^{178}\text{Hg}) = 68(11) \%$ [8]. Výsledná hodnota je $P_{\beta\text{DF}}(^{178}\text{Tl}) = (2,8 \pm 1,1) \times 10^{-3}$. Identifikovali sme produkty premeny v α spektre a určili vetviace pomery α premeny alebo ich limity pre izotopy ^{178}Tl , ^{178}Au , ^{174}Au , ^{174}Pt , ^{170}Ir a ^{170}Os . Pre ^{178}Tl bol tento pomer určený prvý krát, hodnota je $b_\alpha(^{178}\text{Tl}) = 53(4) \%$.



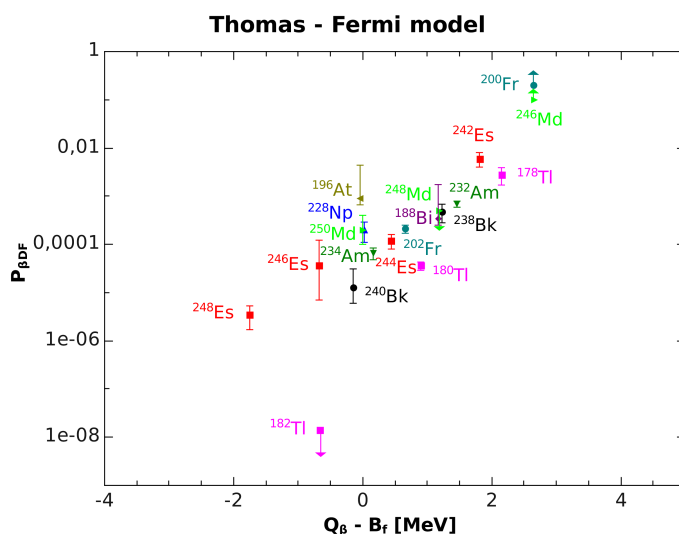
Obr. 4: Spektrum štípných fragmentov ^{178}Hg .

V meraní s priamou produkciou ^{182}Tl nebolo zaznamenané ani jedno štípenie, preto bolo možné určiť iba horný limit pravdepodobnosti βDF . Na výpočet sme použili vetviaci pomer ^{182}Hg z literatúry $b_\alpha(^{182}\text{Hg}) = 15,2(8) \%$ [9]. Získaný limit je $P_{\beta\text{DF}}(^{182}\text{Tl}) < 1,4 \cdot 10^{-8}$.



Obr. 5: Alfa spektrum merania ^{202}Fr .

Pri meraní s priamou produkciou ^{202}Fr (obr. 5) bolo od tohto izotopu zaznamenaných o tri rády viac α častíc, než v predošlých experimentoch [10], [11]. Bolo zaregistrovaných 33 štípných fragmentov ^{202}Rn , ktorý je produktom β^+/ε premeny ^{202}Fr . S použitím známeho vetviaceho pomeru α premeny ^{202}Rn $b_\alpha(^{202}\text{Rn}) = 78(8) \%$ [12] sme vypočítali pravdepodobnosť βDF : $P_{\beta\text{DF}}(^{202}\text{Fr}) = (2,1 \pm 0,4) \times 10^{-4}$. Z α spektra sme odvodili vetviace pomery α premeny alebo ich limity pre izotopy $^{202}\text{Fr} + ^{202\text{m}}\text{Fr}$, ^{198}At , $^{198\text{m}}\text{At}$, ^{202}Po , ^{198}Po a ^{194}Bi . Zmiešaný vetviaci pomer, ktorý sme určili pre $^{202}\text{Fr} + ^{202\text{m}}\text{Fr}$ má hodnotu $b_\alpha(^{202}\text{Fr} + ^{202\text{m}}\text{Fr}) = 95,7(4) \%$ a ukazuje, že aspoň pre jeden z týchto stavov je výraznejšia vetva pre β^+/ε premenu, než sa doteraz predpokladalo. V literatúre je pre oba stavy iba limit $b_\alpha \leq 100 \%$ [10].



Obr. 6: Systematika experimentálnych hodnôt $P_{\beta\text{DF}}$ v závislosti od hodnôt $Q_\beta - B_f$ vypočítaných na základe Thomas-Fermi modelu. Použité hodnoty a referencie sú uvedené v práci.

V práci sme zostavili dve systematiky závislosti experimentálne určených hodnôt $P_{\beta\text{DF}}$ od hodnôt $Q_\beta - B_f$, určených na základe modelov štípných bariér a hmotnostných úbytkov. Uvádzame tu systematiku zostavenú na základe Thomas-Fermi modelu (obr. 6).

Štiepne baréry sme vypočítali postupom uvedeným v [13] a hmotnostné úbytky na výpočet Q_β sme prevzali z [14]. Hodnoty $P_{\beta DF}$ vykazujú exponenciálnu závislosť od rozdielu $Q_\beta - B_f$. Pravdepodobnosti βDF pre ^{178}Tl a ^{202}Fr výborne do systematiky zapadajú, naopak limit pre ^{182}Tl systematiku narúša. Nesúlad môže byť spôsobený vyššou štiepnou bariérou v ^{182}Hg , než predpovedajú modely alebo v ^{182}Hg nedochádza k obsadzovaniu excitovaných hladín dostatočne blízko vrcholu štiepnej bariéry, napriek dostatočne veľkej hodnote Q_β . Môže ísť aj

Izotop	$P_{\beta DF}$	B_f [MeV]
^{178}Tl	$(2,8 \pm 1,1) \times 10^{-3}$	$8,9 \pm 1$
^{180}Tl	$(3,9 \pm 1,1) \times 10^{-5}$	$10,6 \pm 1$
^{182}Tl	$< 1,4 \times 10^{-8}$	$> 13,4$
^{202}Fr	$(2,1 \pm 0,4) \times 10^{-4}$	$8,4 \pm 1$

Tab. 1: Pravdepodobnosti βDF skúmaných izotopov a odhad výšky štiepných bariér produktov ich β^+/ϵ premeny na základe fitovania systematiky podľa Thomas-Fermi modelu.

o kombináciu týchto dvoch okolností. Pomocou fitovania systematiky zostavenej na základe Thomas-Fermi modelu sme urobili odhad výšky štiepných bariér pre produkty β^+/ϵ premeny skúmaných izotopov (tab. 1). Nezvyčajná hodnota $P_{\beta DF}$ pre ^{182}Tl je v tomo odhade vysvetľovaná iba výškou štiepnej bariéry.

Vetviace pomery odvodené v našej práci sú prevažne vo veľmi dobrom súlade s predošlými meraniami.

Literatúra:

- 1) H. L. Hall a D. C. Hofmann, *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* 42, 147 (1992).
- 2) K. S. Krane, *Introductory Nuclear Physics*. John Wiley and Sons, Hoboken (1988).
- 3) J. J. Cowan, a F. K. Thielemann, *Physics Today*, 47 October (2004).
- 4) I. V. Panov et al., *Nucl. Phys. A* 747, 633 (2005).
- 5) The ISOLDE facility. Dostupné na internete: <http://isolde.web.cern.ch/ISOLDE/>
- 6) A. N. Andreyev et al., *Phys. Rev. Lett.* 105, 252502 (2010).
- 7) J. Elseviers, Diplomová práca. Katholieke Universiteit, Leuven (Belgicko) (2009).
- 8) K.S.Toth et. al., *Phys. Rev. C* 60, 011302 (1999).
- 9) U. J. Schrewe et al., *Phys. Lett. B* 91, 46 (1980).
- 10) M. Huyse et al., *Phys. Rev. C* 46, 1209 (1992).
- 11) J. Uusitalo et al., *Phys. Rev. C* 71, 024 306 (2005).
- 12) National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory. Dostupné na internete: <http://www.nndc.bnl.gov/>
- 13) W. D. Myers, a W. J. Swiatecki, *Phys. Rev. C* 60, 014606 (1999).
- 14) W. D. Myers, a W. J. Swiatecki, *Table of Nuclear Masses according to the 1994 Thomas-Fermi Model* (1994). Dostupné na internete: <ftp://www-nsdth.lbl.gov/pub/myers/ms-mass-table>

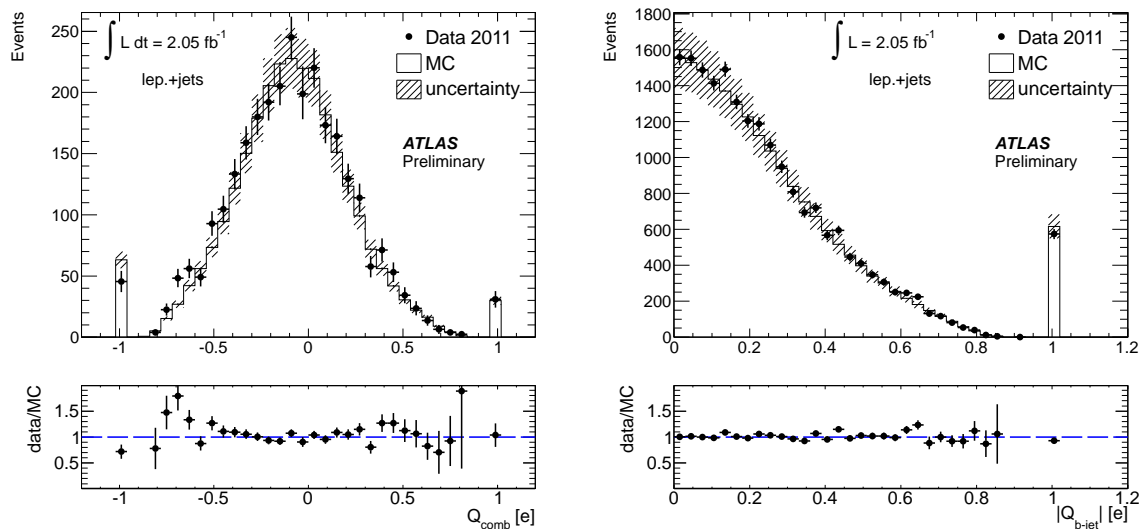
Kalibrácia náboja b -jetu

Matej Melo^{*1}

¹Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

**email: matej.melo@gmail.com*

V roku 1995 bol v experimentoch D0 a CDF [1, 2] v americkom Fermilabe potvrdený objav novej častice. Všeobecne bolo prijaté, že ide o top -kvark s nábojom $+2/3e$ predpovedaný Štandardným modelom (SM), no experimentálne zatiaľ nebol definitívne vylúčený ani exotický model (XM), podľa ktorého by išlo o kvark s podobnou hmotnosťou ako top , ale s nábojom $-4/3e$ [3]. Existuje viacero spôsobov, ako postupovať pri experimentálnom skúmaní náboja top -kvarku. Jednou z možností, ktorou sa zaoberáme aj v tejto práci, je pokúsiť sa priamo určiť elektrické náboje jeho rozpadových produktov [4]. V práci podrobne popisujeme túto metódu vrátane tzv. leptón-jetového párovacieho algoritmu (invariant-mass kritéria) a osobitnú pozornosť venujeme nábojovej procedúre na určenie efektívneho náboja b -jetu. Pracovali sme so simulovanými (Monte Carlo - MC) aj reálnymi dátami z experimentu ATLAS, získanými do konca augusta 2011 s celkovou luminozitou 2.05 fb^{-1} . Skúmali sme spektrum tzv. kombinovaného náboja b -jetov (ukážka - obr. vľavo) a tiež spektrá veľkosti náboja b -jetov pred (ukážka - obr. vpravo), aj po leptón-jetovom párovanom algoritme.



Podarilo sa nám nájsť kalibračný vzťah medzi strednou veľkosťou náboja b -jetov pred invariant-mass kritériom a strednou veľkosťou kombinovaného náboja. Získali sme tak nástroj na určenie veľkosti kombinovaného náboja bez potreby aplikovať na eventy invariant-mass kritérium. Inak povedané, zo strednej hodnoty spektra na obr. vpravo sme určili veľkosť strednej hodnoty v spektre na obr. vľavo. Presnosť našej metódy bola pri vzorke o veľkosti 2.05 fb^{-1} na úrovni 10-15%. Očakáva sa, že do konca roka 2012 poskytne experiment ATLAS štatistiku najmenej 10 fb^{-1} , čo by malo znížiť výslednú neistotu na úroveň niekoľkých %. Overili sme tiež výbornú zhodu medzi MC a dátami, čím sme potvrdili veľmi dobrú vyladenosť použitej

nábojovej procedúry.

Literatúra

- [1] S. Abachi et al. (D0 collaboration), Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 2632
- [2] Abe et al. (CDF collaboration), Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 2626
- [3] D. Chang, W.F.Chang, E. Ma, Phys. Rev. D **59** (1999) 091503
- [4] Atlas collaboration, *Expected Performance of the ATLAS experiment*, CERN-OPEN-2008-020, (2008) 1001-1011

Low temperature proton polarized target at COMPASS¹⁾

Pešek Michael^{1,*}

1. Faculty of mathematics and physics, Charles university, Prague

** kolp@centrum.cz*

Overview of basics of deep inelastic scattering of charged lepton on nucleon and process of dynamic polarization with emphasis to importance of polarization determination for nucleon structure studies are given along with the description of principles of polarization measurement using NMR technique. This is followed by description of COMPASS experiment with emphasis given to polarized target. General procedure of NMR data analysis is given and TE calibration and polarization for run 2010 and relaxations rates are determined. Obtained results are compared in detail to official results obtained by Polarized target group of COMPASS experiment.

References:

- 1) P. Abbon et al.: The COMPASS experiment at CERN, NIM-A577, 455-518, 2007

Lepton Flavour Violating τ and μ Decays in Supersymmetric Theories

Michal Koval'
koval5@uniba.sk

Supervisor: Tomáš Blažek

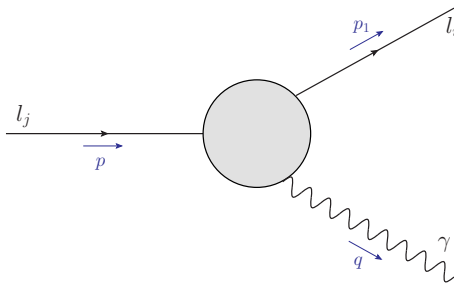
Department of Theoretical Physics and Didactics of Physics, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstract: In this work, lepton flavour violating (LFV) τ and μ decays are studied. No such decays have been observed so far. This is in agreement with the Standard Model with massless neutrinos since this model strictly conserves lepton flavour. However, we already know due to observations of neutrino oscillations that lepton flavour is *not* conserved in nature. There are extensions of the Standard Model that describe neutrino oscillations correctly, and at the same time, predict LFV processes involving charged leptons at rates that could be observable at experiments in the near future. We work in the Minimal Supersymmetric Standard Model (MSSM) with LFV generated by the see-saw mechanism at some high energy scale. The analytical result of a one-loop computation of the studied decays is presented. In the numerical analysis, the form factors for these processes are investigated. Our original results show that the A_1 form factors can always be safely neglected and in consequence, the constant ratio between $l_j \rightarrow l_i \gamma$ and $l_j \rightarrow 3l_i$ decay rates can be predicted. We show that from the present experimental upper bounds on the selected LFV decays, the MSSM parameters can be constrained significantly.

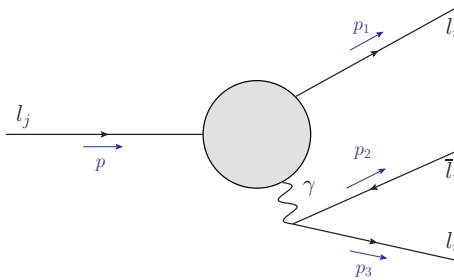
Keywords: Lepton Flavour Violation, Minimal Supersymmetric Standard Model, τ and μ decays

Form factors

Here we introduce the form factors for the processes $l_j \rightarrow l_i \gamma$ and $l_j \rightarrow 3l_i$.¹ For the decay $l_j \rightarrow 3l_i$, we use dominant photon-penguin approximation. Contributions from other box and penguin diagrams are few orders smaller [1].



(1.1) $l_j \rightarrow l_i \gamma$



(1.2) $l_j \rightarrow l_i l_i \bar{l}_i$

From the Lorentz structure, we can see the amplitude of the process $l_j \rightarrow l_i \gamma$ (on-shell photon) in general form:

$$\mathcal{M} = \varepsilon^\mu(q) \bar{u}_i(p_1) [i m_{l_j} \sigma_{\mu\nu} q^\nu (A_2^L P_L + A_2^R P_R)] u_j(p) \quad (1)$$

For the decay $l_j \rightarrow \gamma^* l_i \rightarrow l_i l_i \bar{l}_i$, we can work in ($q^2 \rightarrow 0$) limit, because $q^2 \approx m_j^2 \ll m_{\text{susy}}^2$. Hence, the amplitude for this process can be written as:

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = & \bar{u}_i(p_1) \left[q^2 \gamma_\mu (A_1^L P_L + A_1^R P_R) + \right. \\ & \left. + i m_{l_j} \sigma_{\mu\nu} q^\nu (A_2^L P_L + A_2^R P_R) \right] u_j(p) \quad (2) \\ & \times \frac{e^2}{q^2} \bar{u}_i(p_2) \gamma^\mu v_i(p_3) - (p_1 \leftrightarrow p_2) \end{aligned}$$

Using the expressions for the amplitudes, we can calculate decay rates of the studied processes. The calculation of these rates is quite difficult (especially for the three body decay). We have nevertheless verified all the intermediate steps of this calculation. Due to limited space, in this paper we only show the results of the computations in terms of the introduced A form factors.

¹ $l_i = (e, \mu, \tau)$, for $i = 1, 2, 3$

$l_j \rightarrow l_i \gamma$ decay rate

$$\Gamma(l_j^- \rightarrow l_i^- \gamma) = \frac{e^2}{16\pi} m_{l_j}^5 \left[|A_2^L|^2 + |A_2^R|^2 \right] \quad (3)$$

$l_j \rightarrow 3 l_i$ decay rate

$$\begin{aligned} \Gamma(l_j^- \rightarrow l_i^- l_i^- l_i^+) &= \frac{e^4}{512\pi^3} m_{l_j}^5 \left[|A_1^L|^2 + |A_1^R|^2 - 2 \left(A_1^L A_2^{R*} + A_2^L A_1^{R*} + h.c. \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(|A_2^L|^2 + |A_2^R|^2 \right) \left(\frac{16}{3} \log \frac{m_{l_j}}{m_{l_i}} - \frac{22}{3} \right) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

From the decay rate formula for the process $l_j \rightarrow 3 l_i$, we can see that it is reasonable to study relative sizes of the $A_1^{L,R}$ and $A_2^{L,R}$ form factors. All of the form factors in the MSSM have two contributions (from the chargino and the neutralino sector).

$$A_a^{L,R} = A_a^{(c)L,R} + A_a^{(n)L,R}, \quad a = 1, 2 \quad (5)$$

Analytical results

Here we present the analytical results of one-loop computation of the form factors calculation in the MSSM. Our results agree with the previous computations [1, 2].

Chargino results, with $x_{AX} = m_A^2/m_{\tilde{\nu}_X}^2$.

$$\begin{aligned} A_1^{(c)L} &= -\frac{1}{576\pi^2} \sum_{A=1}^2 \sum_{X=1}^3 C_{iAX}^R C_{jAX}^{R*} \frac{1}{m_{\tilde{\nu}_X}^2} \\ &\quad \frac{16 - 45x_{AX} + 36x_{AX}^2 - 7x_{AX}^3 + 6(2 - 3x_{AX}) \log x_{AX}}{(1 - x_{AX})^4} \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} A_2^{(c)L} &= -\frac{1}{32\pi^2} \sum_{A=1}^2 \sum_{X=1}^3 \frac{1}{m_{\tilde{\nu}_X}^2} \left[\right. \\ &\quad C_{iAX}^L C_{jAX}^{L*} \frac{2 + 3x_{AX} - 6x_{AX}^2 + x_{AX}^3 + 6 \log x_{AX}}{6(1 - x_{AX})^4} \\ &\quad + \frac{m_{l_i}}{m_{l_j}} C_{iAX}^R C_{jAX}^{R*} \frac{2 + 3x_{AX} - 6x_{AX}^2 + x_{AX}^3 + 6 \log x_{AX}}{6(1 - x_{AX})^4} \\ &\quad \left. + \frac{m_A}{m_{l_j}} C_{iAX}^L C_{jAX}^{R*} \frac{-3 + 4x_{AX} - x_{AX}^2 - 2 \log x_{AX}}{(1 - x_{AX})^3} \right] \end{aligned} \quad (7)$$

$$A_a^{(c)R} = A_a^{(c)L} \Big|_{L \leftrightarrow R} \quad (8)$$

Neutralino results, with $x_{AX} = m_A^2/m_{\tilde{l}_X}^2$.

$$\begin{aligned} A_1^{(n)L} &= \frac{1}{576\pi^2} \sum_{A=1}^4 \sum_{X=1}^6 N_{iAX}^R N_{jAX}^{R*} \frac{1}{m_{\tilde{l}_X}^2} \\ &\quad \frac{2 - 9x_{AX} + 18x_{AX}^2 - 11x_{AX}^3 + 6x_{AX}^3 \log x_{AX}}{(1 - x_{AX})^4} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} A_2^{(n)L} &= \frac{1}{32\pi^2} \sum_{A=1}^4 \sum_{X=1}^6 \frac{1}{m_{\tilde{l}_X}^2} \left[\right. \\ &\quad N_{iAX}^L N_{jAX}^{L*} \frac{1 - 6x_{AX} + 3x_{AX}^2 + 2x_{AX}^3 - 6x_{AX}^2 \log x_{AX}}{6(1 - x_{AX})^4} \\ &\quad + \frac{m_{l_i}}{m_{l_j}} N_{iAX}^R N_{jAX}^{R*} \frac{1 - 6x_{AX} + 3x_{AX}^2 + 2x_{AX}^3 - 6x_{AX}^2 \log x_{AX}}{6(1 - x_{AX})^4} \\ &\quad \left. + \frac{m_A}{m_{l_j}} N_{iAX}^L N_{jAX}^{R*} \frac{1 - x_{AX}^2 + 2x_{AX} \log x_{AX}}{(1 - x_{AX})^3} \right] \end{aligned} \quad (10)$$

$$A_a^{(n)R} = A_a^{(n)L} \Big|_{L \leftrightarrow R} \quad (11)$$

Numerical results

Firstly, we examine dependence of the values of the $A_1^{L,R}$ and $A_2^{L,R}$ form factors on the MSSM parameters.

Figure 1: Absolute values of the form factors for $\tau \rightarrow \mu \gamma^*$ in a logarithmic scale. Dependence on the off-diagonal slepton matrix elements.

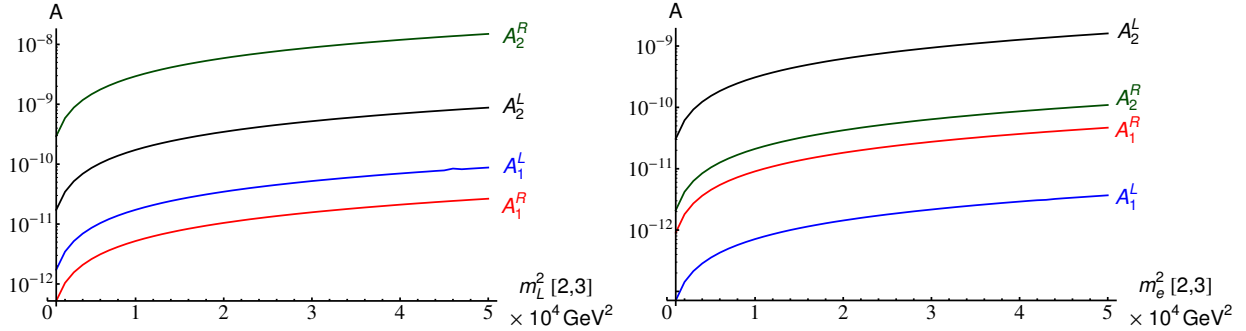
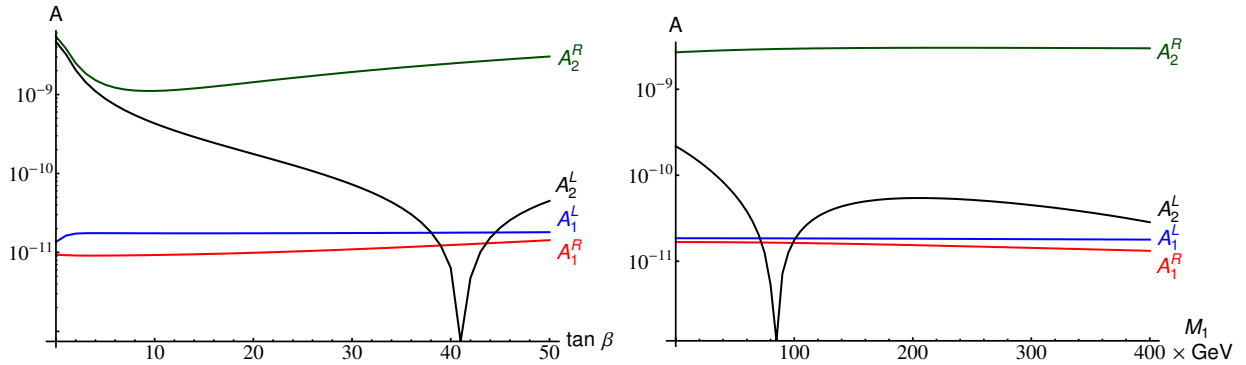


Figure 2: Absolute values of the form factors for $\tau \rightarrow \mu \gamma^*$ in a logarithmic scale. Dependence on some MSSM parameters.



In these plots we see clear dominance of at least one of the A_2 form factors over the A_1 form factors. In fact, in all our investigations A_1 s can always be safely neglected. This possibility has been noted in the literature. However it has never been studied as extensively as in our analysis.

As a result, from the equations (3) and (4) we can estimate the ratio:

$$\frac{BR(l_j \rightarrow 3l_i)}{BR(l_j \rightarrow l_i \gamma)} = \frac{\alpha}{3\pi} \left(\log \frac{m_{l_j}^2}{m_{l_i}^2} - \frac{11}{4} \right) \quad (12)$$

which leads to the approximate values of 1/440, 1/94 and 1/162 for $(l_j, l_i) = (\tau, \mu), (\tau, e)$ and (μ, e) , respectively. If the LFV τ and μ decays begin to be observed at experiments, these ratios will provide very interesting and testable prediction of the MSSM.

Now we look into experimentally more interesting results - the branching ratios of the τ and μ LFV decays. No such decay has been observed so far, but experiments are looking for the LFV processes and pushing upper limits down. As we have proved above, the A_1 form factors are negligible and we can calculate the branching ratio $BR(l_j \rightarrow 3l_i)$ from the known, bigger $BR(l_j \rightarrow \gamma l_i)$. Hence, in the following plots, only $BR(l_j \rightarrow \gamma l_i)$ are shown because the theoretical predictions are at the same order as the experimental bounds. The horizontal lines in the plots represent the current upper experimental bounds. We see that the LFV decays do provide a very efficient tool to constrain the parameters of the MSSM.

Figure 3: Dependence of the $\tau \rightarrow \mu \gamma$ branching ratio on the [2,3] off-diagonal slepton matrix elements.

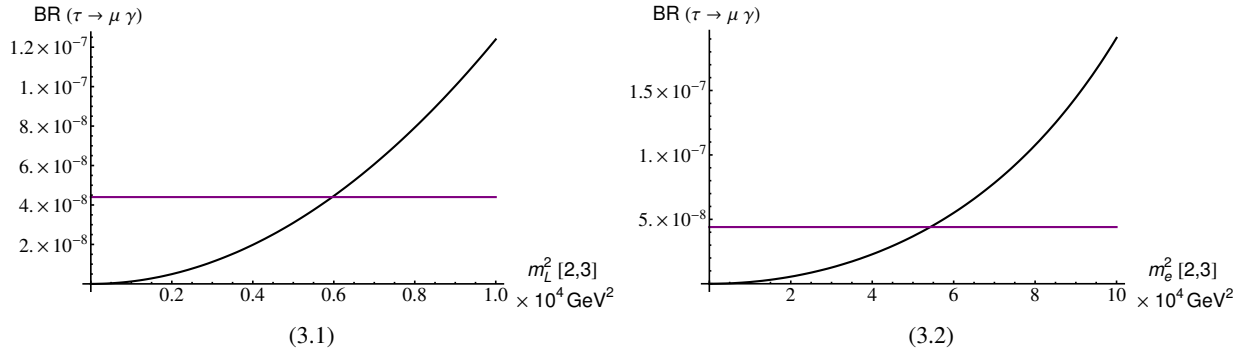


Figure 4: Dependence of the $\mu \rightarrow e \gamma$ branching ratio on the [1,2] off-diagonal slepton matrix elements.

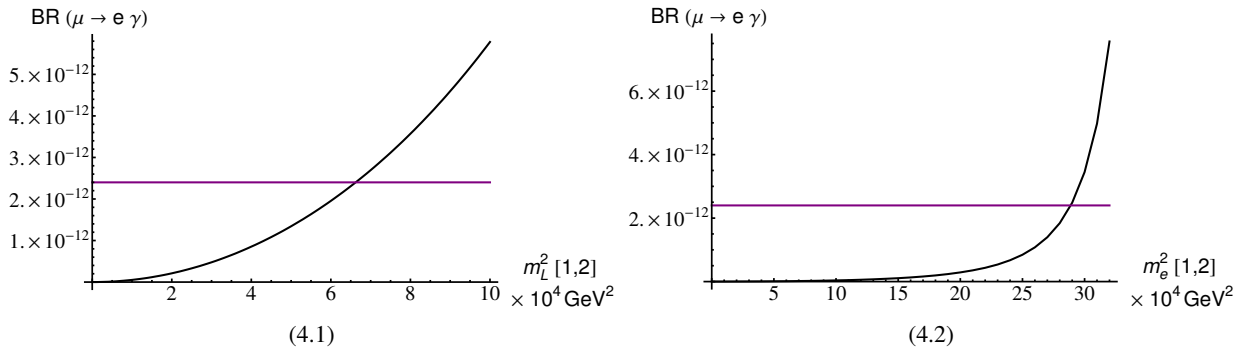
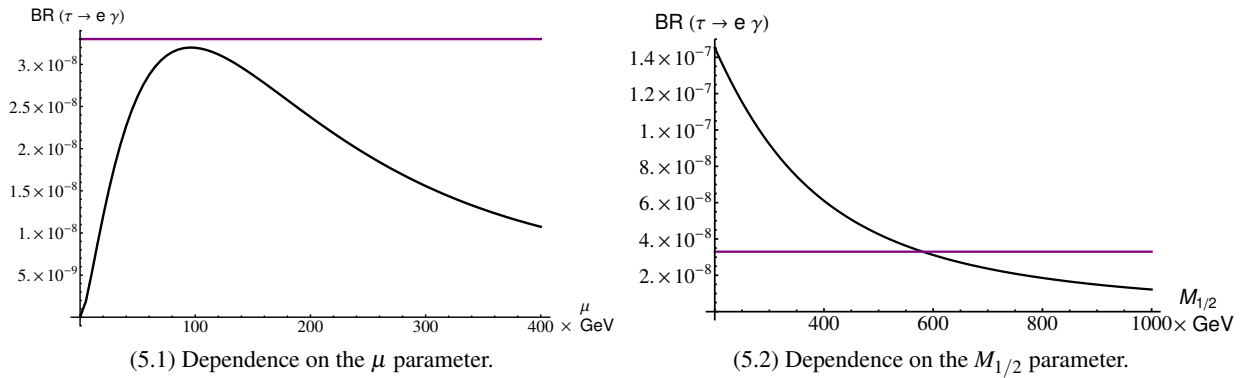


Figure 5: Dependence of the $\tau \rightarrow e \gamma$ branching ratio on some MSSM parameters.



References

- [1] E. Arganda and M. J. Herrero, "Testing supersymmetry with lepton flavor violating τ and μ decays," *Phys. Rev. D*, vol. 73, p. 055003, Mar 2006. arXiv:hep-ph/0510405v3.
- [2] J. Hisano, T. Moroi, K. Tobe, and M. Yamaguchi, "Lepton-flavor violation via right-handed neutrino yukawa couplings in the supersymmetric standard model," *Phys. Rev. D*, vol. 53, pp. 2442–2459, Mar 1996. arXiv:hep-ph/9510309.

LASER TESTY DETEKTORŮ TYPU DEPFET

Malina Lukáš^{1,*}

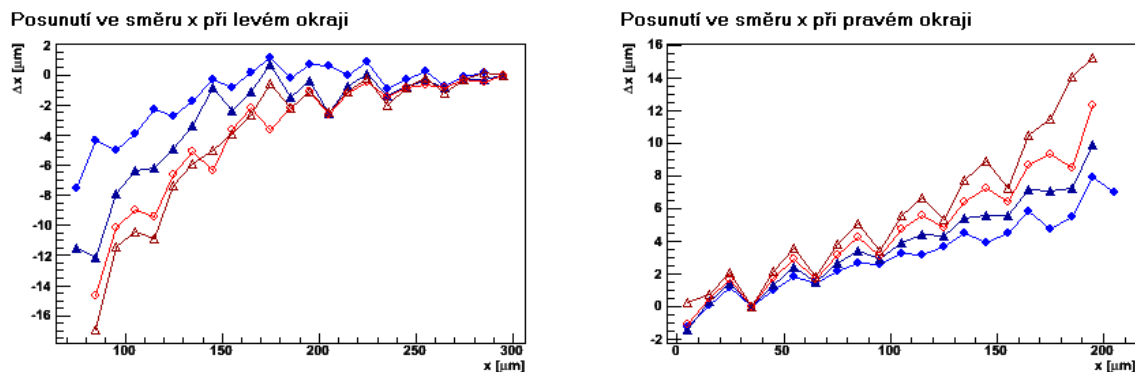
1. Ústav částicové a jaderné fyziky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Praha, Česká republika

* lukas-malina@seznam.cz

V současnosti se v experimentech fyziky vysokých energií produkují částice s energií v řádu GeV až TeV, což je dostačující pro produkci mnoha dalších částic, často velmi hmotných a nestabilních. Zpětná rekonstrukce takovýchto komplikovaných událostí vyžaduje změření či vypočtení mnoha veličin jako jsou například jednotlivé pozice průletu, hybnosti, energie atd. To klade velké nároky na použité detektory, které jsou v dnešní době již velmi složitými zařízeními skládajícími se ze širokého spektra různých subdetektorů. Jedním z typů takových subdetektorů jsou křemíkové polohově citlivé pixelové detektory typu DEPFET (z anglického DEpleted Field Effect Transistor).

Pixelové detektory typu DEPFET v sobě kloubí detekci a první stupeň zesílení signálu, a to integrací polem ovládaného MOSFET tranzistoru na zcela vyčerpaný křemíkový substrát. DEPFET detektory byly vynalezeny před více než dvaceti lety a stále jsou vyvíjeny, například pro japonský experiment Belle II. V této práci byl zkoumán posun vypočtených poloh zásahu u okrajů detektoru směrem ven, tzv. okrajový efekt. Hlavním cílem této práce bylo seznámit se s detektory částic a jejich principy a speciálně s maticemi DEPFET, sestavit laserovou testovací aparaturu, napsat ovladačí makro (ROOT) pro automatizaci měření, provést vlastní měření a analyzovat získaná data. Pro tyto účely jsme použili třínanosekundové červené laserové pulsy, stolky s pojezdy s velmi jemným krokem a dva pulsní generátory.

Posunutí těžiště zásahu vypočtené z dat vůči pozici laseru bylo změřeno u všech okrajů matice DEPFET detektoru pro různá napětí vnějšího okruhu (viz Obrázek 1). Výsledkem práce je optimalizace napětí mezi vnějším okruhem a vnitřkem aktivní oblasti detektoru, která zredukovala okrajový efekt cirka na polovinu.



Obrázek 1: Souhrné grafy posunutí ukazují rozdíl mezi pozicí těžiště zásahu vypočtené z dat a pozicí laseru. Výsledky jsou ukázány pro napětí: 4 V (světle modré), 6 V (tmavě modré), 8 V (světle červené), 10 V (tmavě červené). Napětí vnějšího okruhu jsou vzhledem ke zdroji.

AZIMUTÁLNE KORELÁCIE V ULTRARELATIVISTICKÝCH JADROVÝCH ZRÁŽKACH

Zuzana Fecková^{1,*}

1. Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika

* feckova_zuzana@yahoo.com

V tejto práci sa zaoberáme štúdiom azimutálnych korelácií hadrónov v ultrarelativistických jadrových zrážkach, ktoré vzbudili záujem pre možnosť pozorovania chirálneho magnetického efektu v kvarkovo-gluónovej plazme [1]. My tieto korelácie skúmame v súvislosti s presným dodržaním zákonov zachovania hybnosti a elektrického náboja, ktoré tiež prispievajú do pozorovateľných veličín a tvoria tak pozadie pre signál chirálneho magnetického efektu.

Chirálny magnetický efekt vedie v hustej jadrovej hmote ku separácii náboja okolo reakčnej roviny (roviny tvorenej osou zväzku a zrážkovým parametrom). Tento jav možno vyjadriť pomocou korelačného parametra $\gamma_{\alpha\beta}$, definovaného nasledovne:

$$\gamma_{\alpha\beta} \equiv \langle \cos(\phi_\alpha + \phi_\beta - \Psi_{RP}) \rangle,$$

kde α a β sú znamienka náboja častíc, ϕ ich azimutálne uhly a Ψ_{RP} je azimutálny uhol reakčnej roviny [2]. Tento parameter dovodzujeme z Fourierovho rozvoja spektra azimutálneho uhla nabitej častice, kde bol pridaný sínusový člen, práve pre opis oddelenia náboja:

$$\frac{dN_\pm}{d\Phi} = 1 + 2v_1 \cos(\Phi - \Psi_{RP}) + 2v_2 \cos(2(\Phi - \Psi_{RP})) + \dots + 2a_\pm \sin(\Phi - \Psi_{RP}) + \dots$$

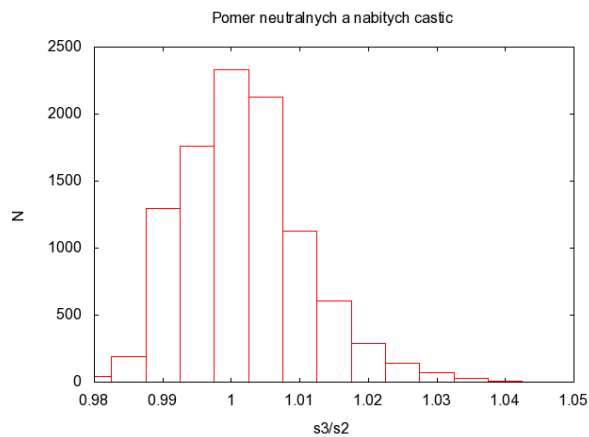
kde v_1 a v_2 sú riadený (directed) a eliptický tok. Separácia náboja je spôsobená fluktuáciami topologického náboja a magnetickým poľom, tvoreným v zrážke ťažkých iónov, ktorých orientácia je v zrážke náhodná. Preto pri stredovaní cez veľký počet prípadov zrážky (eventov) je $\langle a_+ \rangle = \langle a_- \rangle = 0$. Možno ale detegovať fluktuácie $\langle a_+ a_- \rangle$, práve na ktoré je citlivý korelátor $\gamma_{\alpha\beta}$.

Pre dôkladné štúdium týchto čisto kinematických efektov sme si zvolili metódu simulácie lorentzovského invariantného fázového priestoru pomocou generátora REGGAE (REscatterig-after-Genbod GenerAtor of Events), ktorá presne zachováva hybnosť, ktorú sme doplnili algoritmom zabezpečujúcim zachovanie elektrického náboja [3]. Algoritmus tohto generátora je zložený z dvoch krokov. V prvom sú vygenerované hybnosti častíc pomocou rozpadu rezonancií, pričom pre ich určovanie používame predpis:

$$M_i = \sum_{k=1}^i m_k + x_i \left(E^* - \sum_{l=1}^n m_l \right)$$

kde x_i sú náhodné čísla, spĺňajúce podmienku: $x_2 < x_3 < \dots < x_{n-1}$. V druhom kroku prechádzajú generované častice sériou pružných zrážok, čím je dosiahnuté, že generované prípady dobre vyplňajú lorentzovský invariantný fázový priestor.

Zákon zachovania elektrického náboja zabezpečujeme algoritmom na princípe náhodnej chôdze. V prvom kroku po výstupe súboru častíc z REGGAE im algoritmus náhodne prideli náboj, následne ho „vyrovnáva“ v rámci izospinových multipletov. V najjednoduchšom prípade, keď naša simulácia obsahuje iba pióny, kladný, záporný a neutrálny, máme dva možné smery zmeny. V jednom kroku v rámci tohto cyklu sa zo súboru náhodne vyberie častica, náhodne vyberie smer zmeny a zmenu sa akceptuje, ak je výhodná, t.j. ak sa zmenou celkový náboj približuje k požadovanému náboju. Na obr. 1 je znázornený pomer nabitých a neutrálnych piónov, normovaný na počet nabitých častíc. Z obrázka vidíme, že algoritmom nie je preferovaná tvorba neutrálnych ani nabitých častíc, teda funguje správne.



Obr. 1: Pomer počtu nabitých a neutrálnych častíc vo výstupe z tzv. vyrovnávacieho algoritmu

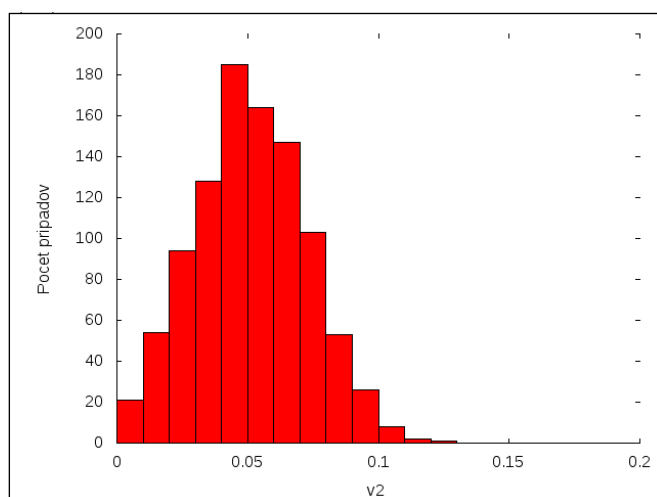
Simuláciu expandujúceho fireballu sme realizovali v REGGAE pomocou generovania dvoch súborov častíc (piónov), ktoré sa od seba vzdiaľujú rýchlosťou v_x , resp. $-v_x$. V týchto súboroch sme následne vyrovnali náboj, čím bol zákon zachovania hybnosti i elektrického náboja presne lokálne

dodržený. Energiu oboch skupiniek častíc sme vždy nastavili tak, aby sme dodržali priemernú energiu piónu $\langle E \rangle = 400 \text{ MeV}$. Takže v závislosti od počtu častíc N , ktorý bolo parametrom simulácie, rovnako ako rýchlosť

expanzie v , celková energia sústavy je $E = 0.4 N \text{ GeV}$.

V predchádzajúcej kapitole sme predstavili metódu simulácie, ktorú sme použili na skúmanie azimutálneho korelačného parametra $\gamma_{\alpha\beta}$. Parametre sme nastavili nasledovne:

$v = 0.1c$, $100 < N < 400$, pri každej multiplicitě sme simulovali 1000 prípadov zrážky. Prvou veličinou, na ktorú sme sa zamerali, bol eliptický tok. Keďže sme sa v tejto metóde snažili nasimulovať expandujúci fireball, je prítomnosť eliptického toku a jeho správne hodnoty, mimoriadne dôležitým faktom. Na obr. 2



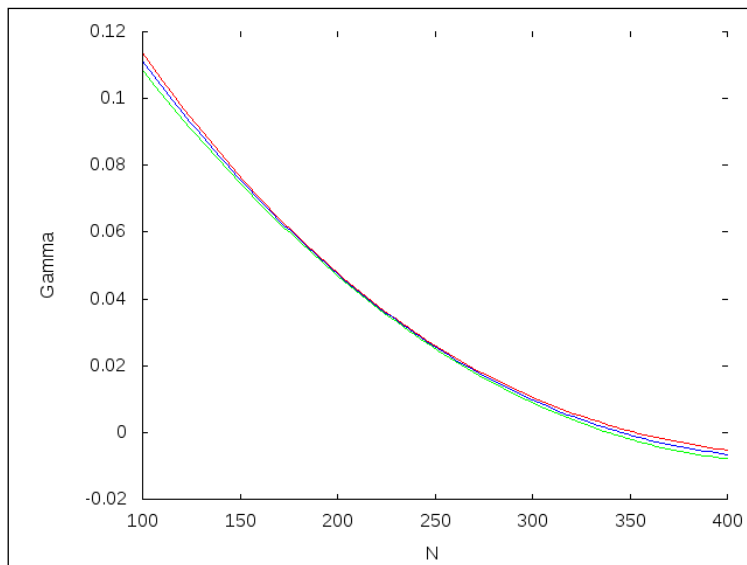
vidíme histogram v_2 , pričom stredná hodnota je: $\langle v_2 \rangle = 0.05$

Obr. 2: Rozloženie eliptického toku v_2 v simulácii

Túto hodnotu sme následne porovnali s výsledkami merania na ALICE, experimente dedikovanému štúdiu

zrážok ťažkých iónov na urýchľovači LHC, kde sme našli výbornú zhodu [4].

Korelačný parameter $\gamma_{\alpha\beta}$ sme počítali samostatne v každom evente, pričom sme generovali 1000 prípadov pre štyri hodnoty multiplicity: $N = 100, 200, 300, 400$.



Obr. 3: Závislosť korelačného parametra γ na počte častíc

Na obr. 3 vidíme, že závislosť korelačného parametra je klesajúca, nezávisí od náboja korelovaných častíc, hodnoty sú prevažne kladné, znamienko mínus nadobúdajú až pri najvyšších multiplicítach.

Porovnali sme túto závislosť s údajmi nameranými na experimente STAR [5]. Tvar krivky pre častice s opačným nábojom sa zhoduje, avšak pre páry s rovnakým znamienkom sa v experimentálnych dátach ukazuje jasný opačný trend. Korelácie pre častice s rovnakým nábojom sú rastúce a záporné. Pri porovnaní s výsledkami simulácie pomocou generátora ultrarelativistických jadrových zrážok HIJING, konštatujeme, že tieto majú rovnaký priebeh ako naše krivky. Z jasných nezrovnalostí medzi experimentálnymi dátami a výsledkami našej simulácie, môžeme usúdiť, že celý pozorovaný efekt nemožno vysvetliť zákonmi zachovania hybnosti a elektrického náboja. Poznávame, že súhlasiace experimentálne výsledky boli dosiahnuté už aj na experimente ALICE [4].

References:

- 1) D. E. Kharzeev, arXiv:hep-ph/0911.3715v1 (2009)
- 2) S. A. Voloshin, Phys. Rev. C 70, 057901 (2004)
- 3) M. Mereš et al., Comput. Phys. Commun. 182, 2561 (2011)
- 4) P. Christakoglou (for the ALICE Collaboration), J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 38, 124165 (2011)
- 5) B. I. Abelev et al. (STAR Collaboration), Phys. Rev. C 81, 054908 (2010)

Príprava vzoriek nanoštruktúr v SEM/FIB a ich štúdium v transmisnom elektrónovom mikroskope

Lavková Jaroslava^{1,*}, Haviar Stanislav¹, Khalakhan Ivan¹, Matolínová Iva,¹ Matolín Vladimír¹, Vorokhta Mykhailo¹, Potin Valerie²

1. *Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra fyziky povrchů a plazmatu, V Holešovičkách 2, 18000 Praha 8, Česká republika*
2. *I.C.B – Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, UMR 5209 CNRS – Université de Bourgogne, 21078 Dijon CEDEX, France*

* jaroslava.lavkova@gmail.com

V súčasnosti je upriamená veľká pozornosť na štúdium štruktúry a vlastností katalyzátorov. Do popredia sa dostávajú systémy nesených kovových častíc na oxidických podložkách. Vzácné kovy dispergované vo vrstvách oxidu nachádzajú uplatnenie v automobilovom priemysle, ako katalyzátory výfukových plynov alebo ako katalyzátory palivových článkov. Technologické aplikácie sú podmienené predovšetkým fyzikálno-chemickými vlastnosťami materiálu, ale taktiež výslednou morfológiou oxidických vrstiev.

Predmetom nášho záujmu sa stal oxid céru dopovaný platinou ($Pt-CeO_2$) ako nadviazanie na radu publikácií [1, 2] a predchádzajúce štúdium na KFPP. Tieto vrstvy vykazujú výraznú katalytickú aktivitu. Presná znalosť štruktúry vrstiev a jednotlivých krokov katalytického procesu môže napomôcť k ich ďalšiemu technologickému uplatneniu.

Táto práca sa venuje vrstvám (Pt -) CeO_2 pripravených magnetronovým naprašovaním. Pozornosť je upriamená na výber vhodného materiálu substrátu, ktorý môže ovplyvniť katalytickú aktivitu takto vytvoreného kompozitu. Štúdium je zamerané na morfológiu povrchu a módy rastu vrstiev oxidu céru.

Primárne overenie morfológie prebiehalo pomocou skenovacej elektrónovej mikroskopie (SEM). Pochopenie vzťahov medzi štruktúrou, chemickým zložením a vykazovanými vlastnosťami v atómovom meradle umožňuje transmisná elektrónová mikroskopia (TEM), ako moderný analytický nástroj. K príprave vzoriek pre TEM bola zvolená progresívna technika „Lift-out“ *in-situ* vykonávaná prostredníctvom fokusovaného iónového zväzku. Osvojenie si tejto metódy a optimalizácia parametrov prípravy boli kľúčovými krokmi práce. Informácia o kryštalickej štruktúre látky bola získaná transmisnou elektrónovou mikroskopiou s vysokým rozlíšením (HRTEM), chemické zloženie látky bolo určené energiovo-disperznou spektroskopiou (EDX) a spektroskopiou charakteristických energetických strát elektrónov.

References:

- 1) V. Matolín, I. Matolínová, M. Václavů, I. Khalakhan, M. Vorokhta, R. Fiala, I. Píš, Z. Sofer, J. Poltířová-Vejpravová, T. Mori, V. Potin, H. Yoshikawa, S. Ueda, K. Kobayashi, *Langmuir*, 26 (15): 12824–12831, (2010).
- 2) I. Matolínová, R. Fiala, I. Khalakhan, M. Vorokhta, Z. Sofer, H. Yoshikawa, K. Kobayashi, V. Matolín: *Appl. Surf. Sci.*, B27, 258 (6): 2161–2164, (2012).

Second sound as a tool to study He II flow

Emil Varga^{1*}

¹*Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Ke Karlovu 3, 121 16 Prague, Czech Republic*

* varga.emil@gmail.com

When the temperature of liquid helium drops below lambda point, or around 2.17K at saturated vapor pressure, it becomes superfluid. Superfluid helium, commonly referred to as He II, possesses a number of remarkable properties, such as extremely high thermal conductivity or, most notably, ability to flow without any dissipation up to some finite velocities. These properties are due to strong influence of quantum effects at this temperature.

Even though hydrodynamics of He II is influenced by quantum mechanics, it can be described very well in terms of phenomenological two-fluid model. One of the very important aspects of hydrodynamics of He II is existence of quantized vortex lines, that is, lines with diameter of the order of 1Å where superfluidity is suppressed and around which the circulation is quantized.

Superfluid helium is also capable of developing turbulent flow, called quantum turbulence, through randomization of distribution and orientation of vortex lines. Understanding this type of turbulence can be a useful tool to understand turbulence in general.

In the presented work, quantum turbulence was studied in a mechanically driven flow of superfluid component only through a 10x10mm square channel blocked at both ends by superleaks. Three aspects of turbulence were studied, namely: steady state, onset of turbulence and its decay, at temperatures 1.35K, 1.65K, 1.75K, 1.95K and 2.05K. One of the main characteristics of quantum turbulence is vortex line density, L . This was measured as a function of flow speed, v , using attenuation of second sound technique.

It was found that in steady state, vortex line density can be described by $L^{1/2} = \gamma(T)(v - v_c)$, where $v_c \approx 0.2\text{cm/s}$ is the critical velocity, which is in agreement with results predicted by Vinen's equation.

The decay was studied by observing time dependence of L after suddenly stopping the bellows. For low steady state vortex line densities and temperatures L obeys the decay solution of Vinen's equation. When initial L or T increase, dependence $L(t)$ becomes more complex and tends to develop a region where the decay appears to be exponential.

SPIN-SPINOVÁ A SPIN-MŘÍŽKOVÁ RELAXACE NMR JADER ^1H V DEUTEROVANÉM ETANOLU A BUTANOLU DOTOVANÉM TEMPO RADIKÁLEM

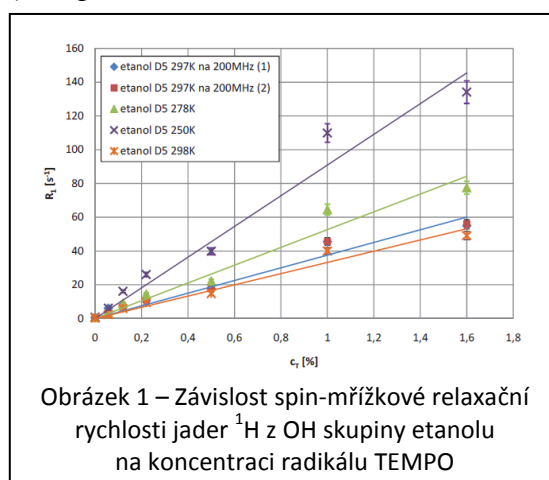
Jan Matoušek^{1,*}

1) Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta

* honza.mat@hmssoft.cz

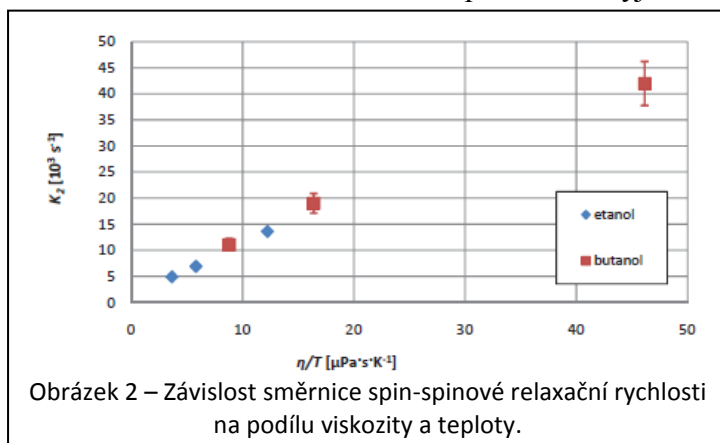
Práce se zabývá studiem deuterovaného etanolu a butanolu (ethyl-D5 alkohol a butyl-D9 alkohol) s malým množstvím (0 – 1,5% hmotnosti) rozpuštěného volného radikálu TEMPO (2,2,6,6-tetramethylpiperidinoxyl) metodami jaderné magnetické rezonance (NMR). Takovéto systémy, ovšem v pevné fázi, nacházejí využití jako materiál pro polarizované terče v experimentech částicové fyziky¹. Cílem práce bylo přispět k porozumění procesu relaxace jaderných spinů v tomto systému.

Stabilní volné radikály disponují elektronem s nevykompenzovaným spinem, který může interagovat s jadernými spiny. Tato interakce může mít charakter dipól-dipólový, nebo, vytvoří-li se vodíková vazba, také kontaktní. Kvůli velkému gyromagnetickému poměru elektronu je tato interakce daleko významnější, než vzájemné interakce jader, a už při malé koncentraci radikálu se stává dominantním relaxačním mechanismem. Formování komplexů alkohol – TEMPO přes vodíkový můstek může díky kontaktní interakci rychlost relaxace výrazně zvýšit. Že tomu tak je, naznačuje práce týmu H. Štěpánkové². Tato práce na článek navazuje naměřením spin-spinových relaxačních dob, porovnáním výsledků pro dva alkoholy s odlišnou viskozitou a při různých teplotách a využitím deuterovaných vzorků.



Obrázek 1 – Závislost spin-mřížkové relaxační rychlosti jader ^1H z OH skupiny etanolu na koncentraci radikálu TEMPO

Deuterizace alkoholů na všech pozicích s výjimkou OH skupiny umožňuje, díky odlišné



Obrázek 2 – Závislost směrnic spin-spinové relaxační rychlosti na podílu viskozity a teploty.

rezonanční frekvenci vodíku a deuteria, zaměřit se na relaxaci samotného vodíku v OH skupině, kterého se týká zmíněná možnost tvorby komplexů.

Měření bylo provedeno na spektrometru vysokého rozlišení Bruker Avance 500 (Larmorova frekvence jader ^1H přibližně 500MHz) při teplotách 298, 278 a

250 K a doplňkově na 200 MHz spektrometru Bruker za pokojové teploty (297 K). Byly změřeny spin-spinové a spin-mřížkové relaxační rychlosti deuterovaného etanolu a butanolu se šesti koncentracemi radikálu TEMPO. K měření spin-spinové relaxační rychlosti byla použita metoda pulsní sekvence CPMG, k měření spin-mřížkové relaxační doby metoda Inversion Recovery.

Byla zjištěna přímá úměrnost obou relaxačních rychlostí a koncentrace radikálu (příklad na obrázku 1), což potvrzuje dominantní úlohu elektronových magnetických momentů v relaxačních procesech. Velký rozptyl naměřených bodů kolem regresní přímky je pravděpodobně důsledkem nepřesného stanovení koncentrace radikálu TEMPO. Přesnost je totiž omezena malým dostupným množstvím deuterovaných alkoholů.

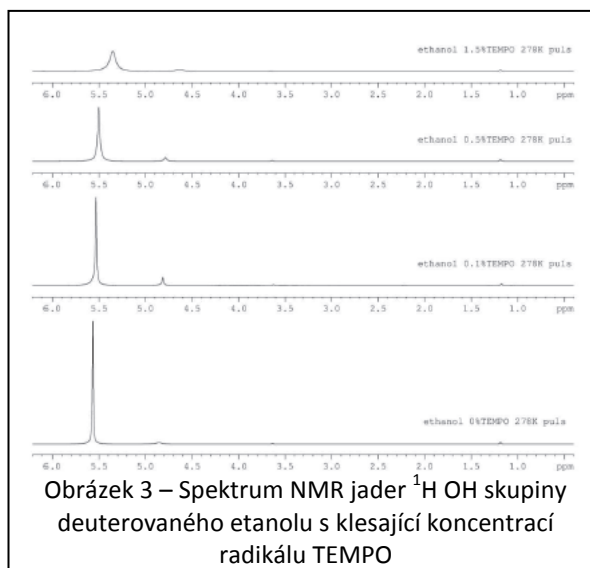
Poměr sklonů závislosti relaxační rychlosti na radikálu pro etanol a pro butanol odpovídá poměru jejich viskozit, a to při všech měřených teplotách (viz obrázek 2 – závislost směrnic relaxačních rychlostí na podílu viskozity a teploty). Výsledek koresponduje s výsledky N. Bloembergena et al. na glycerinu³. Tato závislost odpovídá tomu, že viskozita a teplota jsou určujícími parametry pro rychlost molekulárních pohybů a chemických výměn v kapalině. Právě vzájemné pohyby molekul alkoholu a jsou motorem relaxací.

Interpretace výsledků byla provedena podle teorie BPP³, respektive podle zpřesněné verze, vypracované Solomonem⁴. Relaxační rychlost je podle ní součtem relaxační rychlosti, působené dipól-dipólovými interakcemi, a relaxační rychlosti působené interakcí kontaktní. Za jistých podmínek, které, jak je v práci diskutováno, v našem systému pravděpodobně platí, je dipól-dipólový příspěvek ke spin-spinové i spin-mřížkové relaxační době stejný, zatímco kontaktní interakce přispívá pouze k relaxaci spin-spinové.

Poměr naměřené spin-spinové a spin-mřížkové relaxační rychlosti se pohyboval od 1,3 do 2. Rozdíl je tedy výrazný, což naznačuje přítomnost kontaktní interakce a tedy tvorby komplexů. Další efekt, který potvrzuje tvorbu komplexů je posuv rezonanční frekvence jader ^1H s koncentrací radikálu (viz obrázek 3), který je důsledkem kontaktní interakce⁵.

Na základě rozdílu relaxačních rychlostí a posuvu frekvence byly spočteny hyperjemné konstanty kontaktní interakce jádra ^1H z OH skupiny alkoholu, navázaného na radikál TEMPO vodíkovým můstkem. Jejich hodnoty se pro oba alkoholy při všech teplotách pohybovaly okolo $9 \cdot 10^{-28}$ J.

Podle BPP teorie je k relaxaci prostřednictvím elektronových momentů nezbytně vhodné rychlé změny vzdálenosti elektronu a vodíkového jádra nebo jejich vzájemné orientace vůči vnějšímu magnetickému poli. Přesněji, mají-li tyto změny nenulovou spektrální hustotu



Obrázek 3 – Spektrum NMR jader ^1H OH skupiny deuterovaného etanolu s klesající koncentrací radikálu TEMPO

korelační funkce na Larmorově frekvenci jader ^1H a na součtu a rozdílu Larmorových frekvencí jader ^1H a elektronů, může k relaxaci docházet. Změny orientací a vzdáleností mohou být důsledkem difuze, rotace molekul a chemické výměny. V práci je proveden rozbor možných příspěvků těchto efektů. Interpretace není zcela jednoznačná. Lze ale říci, že doba života komplexů by se měla pohybovat v řádu 10^{-11} s nebo delší. Pro přesnější rozbor relaxačních mechanismů by bylo třeba důkladněji proměřit teplotní závislost ve větším rozsahu teplot a případně provést počítačovou simulaci rotace komplexů alkohol-TEMPO v kapalině.

Literatura:

- 1) S. Mango, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 526 1-6 (2004)
- 2) H. Štěpánková et al., Acta Physica Slovaca 56 2 141-144 (2000)
- 3) N. Bloembergen, E. M. Purcell a R. V. Pound, Physical Review, 73 7 679-712 (1948)
- 4) J. Kowalewski a L. Mäler, Nuclear Spin Relaxation in Liquids: Theory, Experiment and Applications, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton, U. S. A. (2006)
- 5) A. L. Butshatshenko a A. M. Vassermann, Stabilnyje radikaly, Chimia, Moskva (1973)

EXPERIMENTÁLNE ŠTÚDIUM MAGNETOŠTRUKTÚRNYCH KORELÁCIÍ ORGANICKÝCH MAGNETÍK

Šoltésová_Daniela^{1,*}, Kajňaková_Marcela¹, Feher_Alexander¹

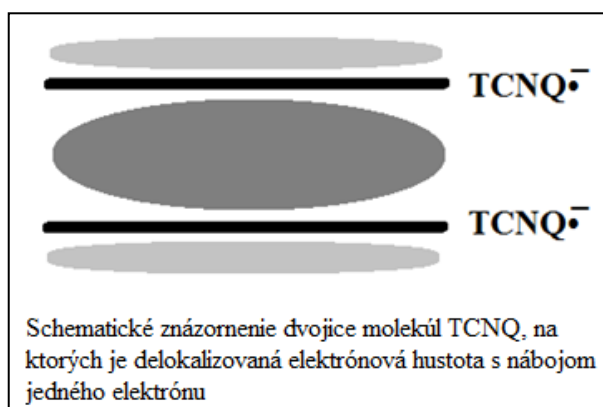
1. Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach,
Park Angelinum 9, SK-04154 Košice, SLOVAKIA

* dankasoltes@gmail.com

V tejto práci predkladáme výsledky nášho skúmania novej organickej ARS na báze TCNQ: (N-Me-2,6-di-Me-Py)(TCNQ)₂ (**I**). Magnetické vlastnosti boli študované meraním susceptibility a poľovej závislosti magnetizácie. Experimentálne dáta a magnetoštruktúrne korelácie boli analyzované pomocou teoretických modelov. Táto látka bola vybraná kvôli predpokladu, že by výnimočne mohla predstavovať magneticky dvojrozmerný systém.

Podnetom pre skúmanie organických anión – radikálových solí (ARS) založených na báze 7, 7, 8, 8 – tetrakyanochinodimetánových molekúl (TCNQ) bol v roku 1960 problém vysokoteplotnej supravodivosti^{1,2} a neskôr aj objavenie organických kovov a supravodičov založených na kation – radikálových soliach a jeho derivátoch³. Do pozornosti sa TCNQ založené na ASR znovu dostali po objavení ich vlastnosti tavenia bez rozkladu^{4,5}, čím sa začal ich ďalší výskum. Takéto zlúčeniny sa môžu použiť v nových typoch elektrolytických metaloxidových pamätiach^{6,7}, ktoré ovládajú vysoko operačné charakteristiky, konkrétne sa jedná o ich schopnosť „sebaregenerácie“ defektov oxidových vrstiev⁸. Z hľadiska uplatnenia sú organické molekulové látky veľmi perspektívnym materiálom kvôli svojim rozmanitým vlastnostiam, ako sú elektrické, optické, magnetické, ale tiež vlastnostiam ako supravodivosť a feromagnetizmus. Tieto látky môžeme tiež zaradiť medzi materiály, ktoré by sa mohli stať vysokoteplotnými supravodičmi, keďže spĺňajú viaceré požiadavky kladené na takéto materiály. Veľkou devízou organických magnetík je skutočnosť, že sa skladajú z ľahko dostupných prvkov a kryštalizujú takmer vždy bez prímiesí v kryštálovej mriežke.

Látka (**I**), ktorú sme študovali, je rýdzo organická a má magnetické vlastnosti, preto ju

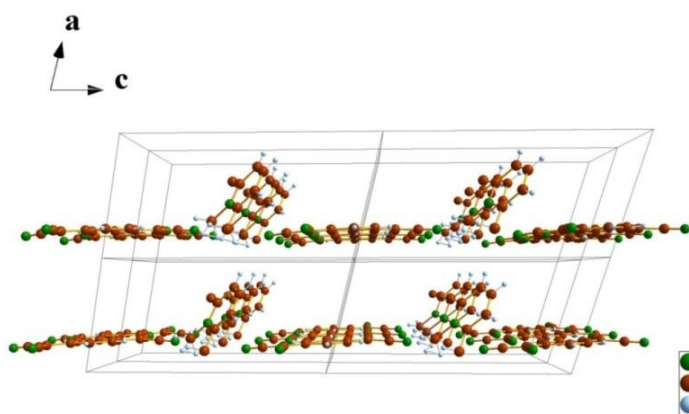


zaraďujeme medzi organické magnetiká. Nosičmi magnetických momentov v organických magnetikách sú molekuly, v našom prípade anión – radikály TCNQ^{•-}. V okolí molekuly TCNQ vznikajú nad a pod molekulou tzv. elektrónové mraky. Tie sú dôsledkom π – prekryvu valenčných orbitálov p alebo d , po ktorých sa pohybujú elektróny.

Ak pri sebe existujú dve molekuly TCNQ, dochádza v rámci stabilizácie anión – radikálu a zníženia energie k delokalizácii elektrónovej hustoty π väzieb. Elektrónové mraky sa preusporiadajú a sústredia sa medzi tieto dve molekuly. Takáto dvojica molekúl TCNQ má elektrónovú hustotu – t.j. náboj, jedného elektrónu so spinom $\frac{1}{2}$ ⁹. Vďaka tomu, že dve molekuly TCNQ nesú spin, môžu medzi sebou magneticky interagovať. Interakcie medzi spinmi sú však často obmedzené len na určitý smer, lebo molekuly sú v priestore presne usporiadané. Kvôli tomu sú molekulové organické magnetiká veľmi často nízkorozmernými systémami.

V uvedenej práci predkladáme výsledky nášho skúmania novej rýdzo organickej ARS na báze TCNQ: (N-Me-2,6-di-Me-Py)(TCNQ)₂, kde (N-Me-2,6-di-Me-Py)⁺ je N-metyl-2,6-dimethyl-pyridinový kation. Magnetické vlastnosti boli študované na našom pracovisku meraním susceptibility v teplotnom rozmedzí 2 – 300 K, v magnetických poliach 10 mT, 100 mT a 1 T. Poľová závislosť magnetizácie bola meraná pri teplotách 2 K, 15 K a 50 K v magnetických poliach do 5 T. Následne boli experimentálne dáta analyzované pomocou teoretických modelov.

Na meranie magnetických vlastností bola použitá komerčná MPMS aparáturu firmy Quantum Design, v ktorej prebieha meranie magnetického momentu na báze SQUID (The superconducting quantum interference device). Látka (**I**) bola v polykryštalickej forme s rozmermi kryštálikov do 1 mm. Signál kapsulky a slamky bol odčítaný ako funkcia magnetického momentu v závislosti od teploty a diamagnetický príspevok látky bol odčítaný pomocou Pascalových konštánt.



Kryštalová štruktúra študovanej vzorky (**I**) je tvorená anión – radikálom TCNQ^{•-} v hlavnej pozícii a kryštalograficky nezávislým N-metyl-2,6-dimethyl-pyridinovým kationom umiestneným v čiastočne centrálne symetrickej pozícii. Vykonané štúdie ukazujú, že ARS má vrstevnatú štruktúru. V nej sa vrstvy tvorené (N-Me-2,6-di-Me-Py)⁺ kationmi striedajú pozdĺž osi *c* s vrstvami pozostávajúcimi z anión – radikálov TCNQ^{•-}.

Tvar molekúl TCNQ, ktoré tvoria π molekulový systém, je takmer rovinný. Kryštalová štruktúra preto pozostáva zo stĺpcov, tvorených molekulami TCNQ, ktoré sú uložené paralelne za sebou. V štruktúre sa zistili mierne skrátene medzimolekulové vodíkové väzby N...H medzi kationovými a aniónovými vrstvami s dĺžkou 2,501 Å, čo z kryštalografického hľadiska spája slabodimerizované stĺpce TCNQ v smere osi *c*.

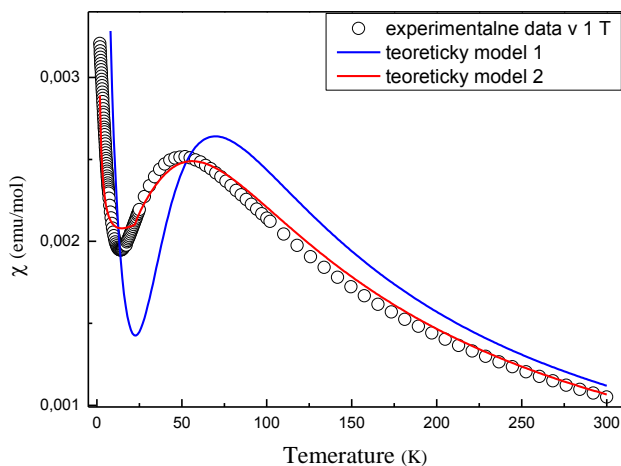
Magnetická susceptibilita látky (**I**) s klesajúcou teplotou postupne narastá. V okolí teploty $T = 50$ K sa nachádza oblé maximum, ktoré je prejavom prítomnosti krátkodosahových interakcií magnetických momentov. Vysokoteplotnú časť susceptibility

sme analyzovali v teplotnom intervale od 150 do 300 K, podľa Currie – Weisssovo zákona, ktorý má tvar $\chi = \frac{C}{T - \theta}$,

kde T je teplota, θ je Weisssova teplota a C je Currieho konštanta. Následne sme vypočítali Weisssovu teplotu $\theta \cong -85$ K. Weisssova teplota je záporná a vychádzajú z Hamiltoniánu

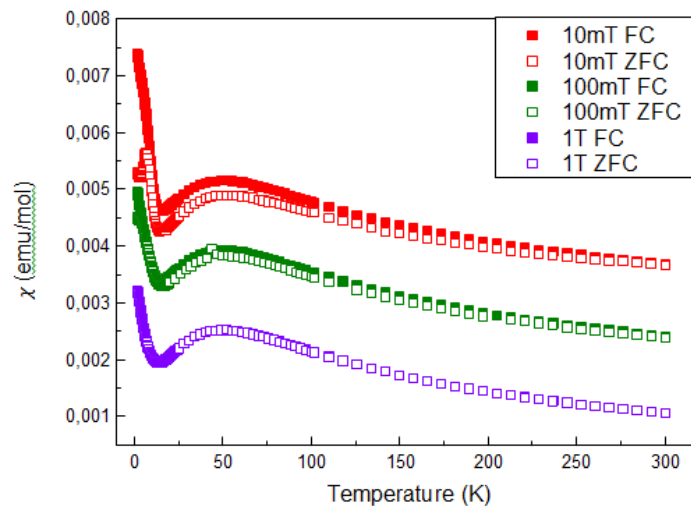
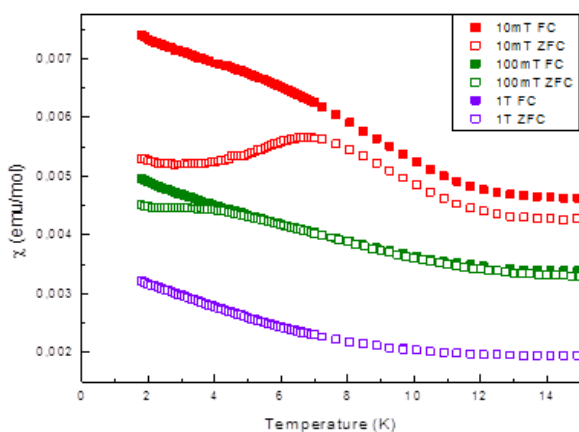
$\hat{H} = -2 \sum_{i < j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j$ môžeme povedať, že interakcie v našej látke sú antiferomagnetické.

Vychádzajú z teplotnej závislosti $\chi \cdot T$, sme vypočítali efektívny magnetický moment látky ako: $\mu_{ef} = 1,58 \mu_B$. Táto hodnota je blízka teoretickej hodnote $1,73 \mu_B$ pre magnetický systém so spinom $1/2$.



izolovaných štruktúrnych dimérov a χ_t je susceptibilita štruktúrnych tetramérov. Číselné riešenie zodpovedajúceho systému dáva odhady: $J = 123,1$ K, $a \sim 0,07$.

Aby sme našli realistickejšiu simuláciu $\chi(T)$, použili sme kombináciu modelu heisenbergovskej spinovej reťazky s periodickými hranicami a malého počtu voľných spinov (červená čiara). Celková molárna susceptibilita má tvar $\chi = N_A \left[a\chi_d(T) + \frac{(1-a)\chi_N(T)}{N} \right]$ a zahŕňa reťazky vytvorené N spinmi (χ_N) a n voľných spinov, pričom množstvo a zodpovedá koncentrácii voľných spinov.



Experimentálne dáta teplotnej závislosti magnetickej dc – susceptibility sme analyzovali pomocou teoretických modelov.

Prvým použitým modelom je model pre izolované štruktúrne diméry, čiže spiny a izolované štruktúrne tetraméry, teda spinové diméry (modrá čiara). Celková molárna susceptibilita takéhoto systému má tvar $\chi = N_A (a\chi_d(T) + (1-a)\chi_t(T)/2)$,

kde $a = \frac{n}{n+m}$, a χ_d je susceptibilita

izolovaných štruktúrnych dimérov a χ_t je susceptibilita štruktúrnych tetramérov. Číselné riešenie zodpovedajúceho systému dáva odhady: $J = 123,1$ K, $a \sim 0,07$.

Aby sme našli realistickejšiu simuláciu $\chi(T)$, použili sme kombináciu modelu heisenbergovskej spinovej reťazky s periodickými hranicami a malého počtu voľných spinov (červená čiara). Celková molárna susceptibilita má tvar $\chi = N_A \left[a\chi_d(T) + \frac{(1-a)\chi_N(T)}{N} \right]$

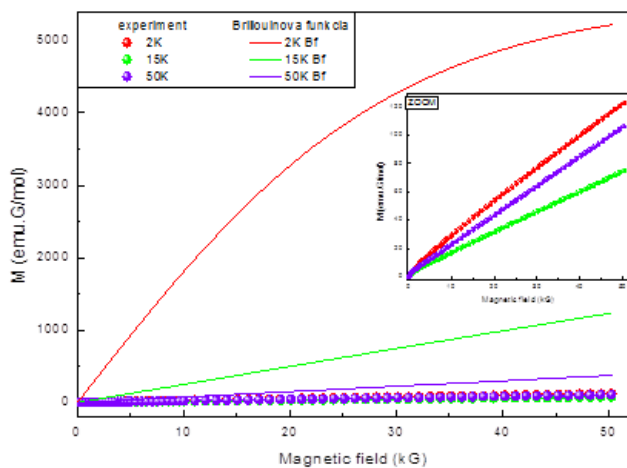
a zahŕňa reťazky vytvorené N spinmi (χ_N) a n voľných spinov, pričom množstvo a zodpovedá koncentrácii voľných spinov.

Pri najnižších teplotách susceptibilita znovu narastá. Usudzujeme, že nárast by mal byť prejavom voľných koncov fragmentov látky.

Pri malých magnetických poliach ako napríklad 10 mT sme pri náraste susceptibility pozorovali ďalšie oblé maximum pri 7 K, ale iba

v meracom režime ZFC. Toto nízkoteplotné oblé maximum pri 7 K sa môže objaviť v dôsledku pôsobenia slabej medzireťazkovej väzby v dôsledku prítomnosti HBs medzi katiónmi a aniónmi.

Pri nízkych teplotách sa dáta pri meracích režimoch ZFC a FC v malých poliach líšia, čo bude ďalej študované.



Závislosť magnetizácie od magnetického poľa sme porovnali s Brillouinovou funkciou pre ideálne paramagnetiku, kde Brillouinova funkcia má tvar $f_B = \frac{1}{2} N_A \mu_B g \tanh \left\{ \frac{1}{2} g \frac{\mu_B B}{k_B T} \right\}$. Porovnaním priebehov experimentálnych dát a Brillouinovej funkcie vieme usúdiť, že vo vzorke sa nachádzajú pomerne silné antiferomagnetické interakcie.

Z analýzy magnetickej susceptibility sme zistili, že magnetický systém (**I**) môže byť popísaný heisenbergovským modelom pre konečnú uniformnú spinovú $\frac{1}{2}$ reťazku s malou koncentráciou voľných koncov, s veľkosťou výmennej interakcie $J = 89,3$ K. V experimentálnej závislosti magnetickej susceptibility sme pozorovali v nízko teplotnej oblasti ďalšie maximum, ktoré môže byť dôsledkom pôsobenia slabej medzireťazkovej väzby v dôsledku prítomnosti HBs medzi katiónmi a aniónmi. Táto úvaha by potvrdila predpoklad v motivácii štúdia, že nami skúmaná látka môže byť magneticky dvojrozmerným systémom.

Referencie

- ¹ W.A. Little, Phys. Rev. A 134 (1964) 1416.
- ² I.F. Schegolev, Phys. Stat. Sol. Ser. A 12 (1972) 9.
- ³ D. Jerome, A. Masaud, M. Ribault et al., J. Phys. Lett. 41 (1980) L95.
- ⁴ M. Tanaka, F. Urano, M. Nakabata, Japan Patent 60-139832 (1987).
- ⁵ V.A. Starodub, V.V. Barabashova, Ye.M. Gluzman et al., USSR Patent No. 1389226 (1987).
- ⁶ Sanyo Electric Co., USA Patent No. 458055 (1986).
- ⁷ V.A. Starodub, Ye.M. Gluzman, K.V. Krikunov et al., USSR Patent 1696428 (1991)
- ⁸ V.A. Starodub, Ye.M. Gluzman, K.I. Pokhodnya, M.Ya. Valah, Theor. Exp. Chem. 29 (1993) 361.
- ⁹ J. Fraxedas, Molecular Organic Materials: From Molecules to Crystalline Solids, Cambridge University Press (2006)

Příprava hydrofobních flurouhlíkových vrstev pomocí metod plazmové polymerace

Petr Martin^{*}, Kylián Ondřej, Solař Pavel, Polonskyi Oleksandr, Artemenko Anna, Biederman Hynek

*Katedra makromolekulární fyziky, MFF UK,
V Holešovičkách 2, 182 00 Praha 8*

** martin_petr@seznam.cz*

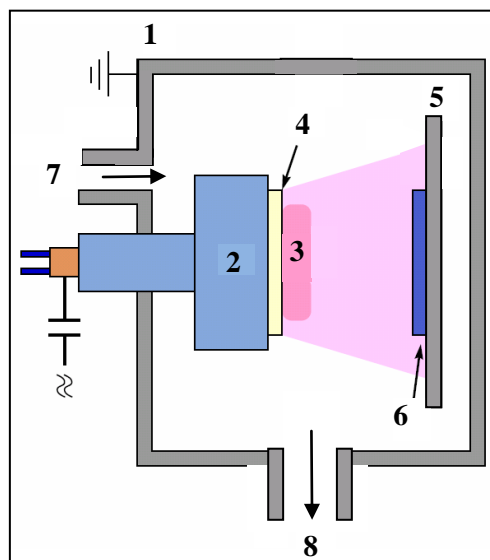
1. Úvod

Tato práce se věnuje přípravě hydrofobních fluorouhlíkových tenkých vrstev metodou magnetronového naprašování polymerního PTFE terče. Ukazuje vliv depozičních podmínek, hlavně tlaku pracovního plynu a výkonu dodaného do systému, na vlastnosti deponovaných vrstev – na jejich chemické složení, morfologii, smáčivost, bariérové a optické vlastnosti, stabilitu i možnost jejich bioaplikace. V práci je využit i nový způsob nezávislé kontroly morfologie a chemického složení povrchu vrstev pomocí depozice podložní vrstvy nanočástic – a to jak kovových (Pt, Cu, Al), tak i polymerních (C:H, plazmově polymerizovaný nylon). Tento způsob přípravy vede k regulaci hydrofobicity vrstev a k depozici vrstev superhydrofobních.

2. Popis experimentu

Depozice flurouhlíkových vrstev probíhala ve vakuové depoziční komoře čerpané difúzní a rotační vývěvou schematicky znázorněné na Obr. 1. Planární, vodou chlazený magnetron byl osazený PTFE terčem. Pro depozici byl použit jako pracovní plyn argon, přičemž jeho tlak byl regulován v rozmezí 5-40 Pa. Maximální použitý RF příkon dodaný do výboje byl 100 W a vzdálenost mezi odprašovaným terčem a substrátem byla 12 cm.

Nanoklastry a nanočástice byly připraveny pomocí plynových agregačních zdrojů, jejichž popis lze nalézt např. v [1].



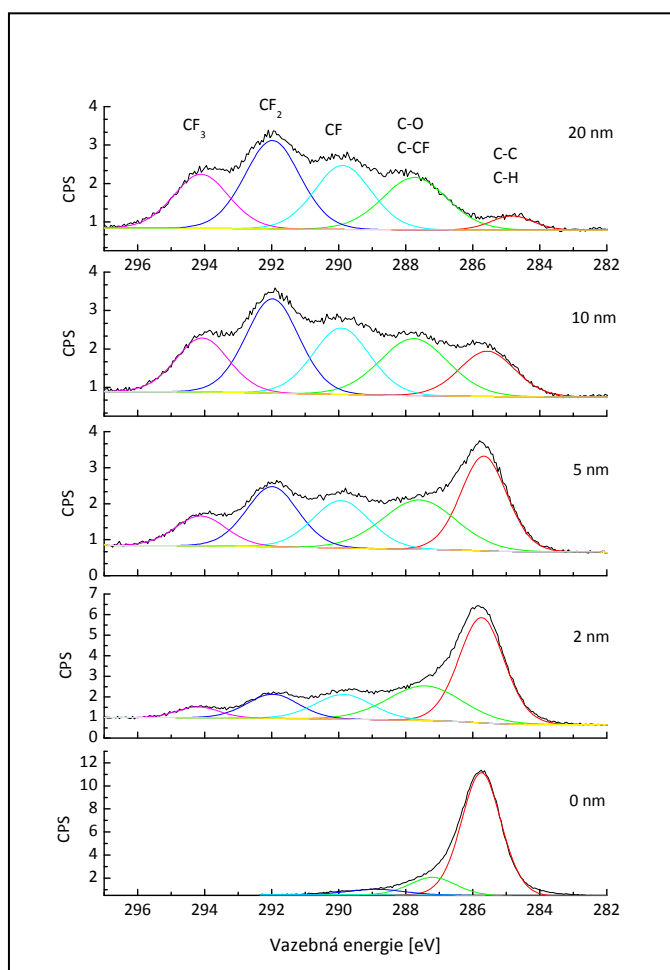
Obr. 1 Schéma aparatury:

1 – vakuová komora, 2 – vodou chlazený magnetron, 3 – plasma, 4 – PTFE terč, 5 – držák vzorků, 6 – vzorek, 7 – přívod pracovního plynu, 8 – čerpání

3. Výsledky

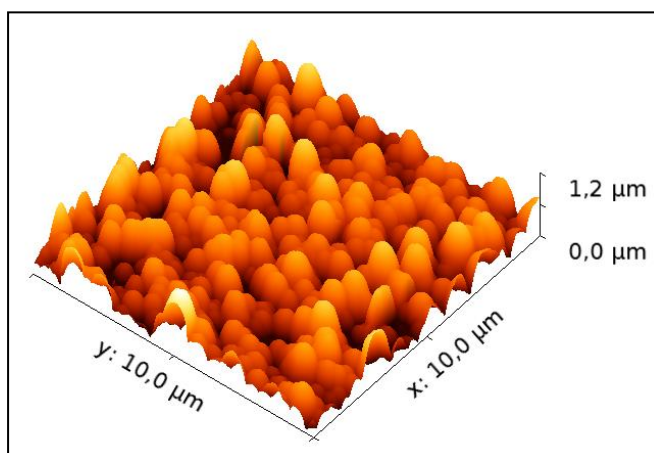
Ukazuje se, že vlastnosti deponovaných plazmově polymerizovaných vrstev (pPTFE) jsou dobře reprodukovatelné, a souhlasí s dosavadními publikacemi v oboru, např. [2,3,4]. Chemické složení vrstev nezávisí na materiálu substrátu ani na drsnosti jeho povrchu, deponované vrstvy jsou v použitém rozsahu tlaků hladké a již pro tloušťku kolem 2 nm mění původní kontaktní úhel substrátu na hodnoty mezi 109° - 120° podle drsnosti původního substrátu. S rostoucím výkonem RF napětí zapalujícího výboj nad magnetronem se zvyšuje Youngův modul pružnosti deponovaných vrstev.

Vrstvy pPTFE jsou pro vlnové délky nad 400 nm transparentní a při depozici na potravinářské fólie snižují jejich propustnost vůči kyslíku až na třetinu. Pro depozice na PP fólii byla provedena zajímavá XPS měření C1s píku v závislosti na tloušťce vrstvy. Ukazuje se, že v počátcích růstu je ve vrstvě vyšší poměrné zastoupení vazeb C-CF a C-F oproti vazbám $-CF_2$ a $-CF_3$, jejichž zastoupení se zvyšuje až později s dále rostoucí vrstvou pPTFE, jak je vidět na Obr. 2.



Obr. 2 Měření XPS C1s píku pro vrstvy pPTFE různých tlouštěk nadeponovaných na PP fólii: a) 20 nm, b) 10 nm c) 5 nm d) 2 nm e) PP fólie bez pPTFE

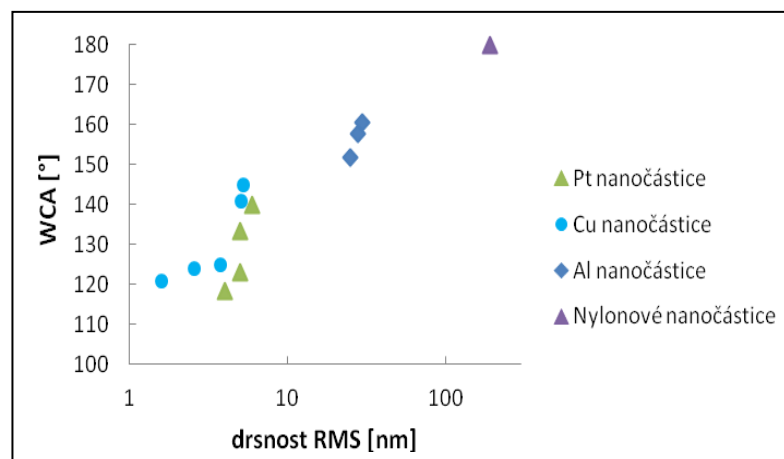
Byla testována i stabilita připravených vrstev, přičemž se ukazuje, že vrstvy jsou nerozpustné ve vodném prostředí i v ethanolu. Biologické testy ukazují, že buňky na pPTFE površích rostou méně než na referenčním polystyrenu, a na tuto vlastnost nemá vliv sterilizace UV zářením nebo suchým teplem při 160°C . Nicméně po sterilizaci autoklávkem se růst buněk na vrstvě prudce zvyšuje. Tyto výsledky jsou velmi důležité pro možné bioaplikace pPTFE vrstev.



Obr. 3 AFM zobrazení připravené superhydrofobní vrstvy nylonových nanočástic + pPTFE

Dále byly připraveny kompozitní vrstvy pPTFE s nanočásticemi z různých materiálů – kovovými (Al, Cu, Pt) i polymerními (C:H, nylon). Různou velikostí těchto nanočástic a jejich depozičním časem můžeme kontrolovat drsnost povrchu, jak bylo potvrzeno AFM měřeními. Následným překrytím vrstvou pPTFE můžeme (příklad AFM zobrazení je uveden na Obr. 3) regulovat povrchové chemické složení nezávisle na drsnosti. To nám umožňuje definovaně měnit hydrofobicitu vrstev, v rozsahu od původních cca 110° až do super-hydrofobních vrstev s kontaktním úhlem přes 160°, jak je vidět na Obr. 4.

Depozice vrstev s nanočásticemi pro kontrolu hydrofobicity povrchu je v oblasti plazmových polymerů aktuální, viz publikace [1,5]. V rámci této práce byly připraveny kompozitní super-hydrofobní vrstvy z polymerních nylonových nanočástic překrytých vrstvou pPTFE. Výhodou tohoto způsobu přípravy super-hydrofobních vrstev je jeho rychlost (cca 15 minut depozice ve dvou oddělených krocích), i nezávislost na materiálu substrátu.



Obr. 4 Závislost kontaktního úhlu na drsnosti připravených nano-kompozitních vrstev

4. Závěr

Práce se stala podkladem pro jeden již publikovaný článek v odborném časopise (O. Kylián, J. Kousal, A. Artemenko, A. Choukourov, M. Petr, O. Polonskyi, D. Slavínská, H. Biederman, *Surface & Coatings Technology* 205 (2011) 558-561) a několik konferenčních příspěvků. Jeden článek byl zaslán a další se připravuje. Originální jsou měření vlivu sterilizace na růst buněk na pPTFE površích, měření počátečních stádií růstu pPTFE vrstvy i měření propustnosti potravinářských fólií pokrytých pPTFE vrstvou, a také příprava super-hydrofobních vrstev pPTFE za použití nylonových nanočástic.

References:

- 1) P. Solař, et al., *Surface and Coatings Technology* (2012), DOI: 10.1016/j.surfcoat.2012.02.005
- 2) H. Biederman, et al., *Thin Solid Films* 392 (2001) 208-213.
- 3) V. Stelmashuk, et al., *Vacuum* 77 (2005) 131-137.
- 4) O. Kylián, et al., *Thin Solid Films* 519 (2011) 6426-6431.
- 5) O. Kylián, et al., *Plasma Process. Polym.* 9 (2012) 180-187.

Teplotná závislosť vodivosti vysokoteplotných supravodičov

ABSTRAKT

Michal Knapek

michal.knapek@gmail.com

Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre

V práci sa zaoberáme rezistivitou supravodivých materiálov v závislosti od teploty. Po stručnom oboznámení sa s teóriou prechádzame ku zostaveniu meracej aparatúry. Táto bude s využitím prístrojov Keithley slúžiť na citlivé merania v oblasti supravodivého prechodu. Riadenie merania je vykonávané prostredníctvom počítača v prostredí softvéru MathWorks- MATLAB, kde sme vytvorili príslušné riadiace programy. Merania boli uskutočnené u nás a v Elektrotechnickom ústave SAV, a to na dvoch rozdielnych vzorkách. V závere kapitoly sa nachádzajú výsledky týchto meraní a ich zhodnotenie. V ďalšej časti práce sa venujeme vytvoreniu jednoduchého modelu teplotnej závislosti rezistivity supravodivých materiálov vychádzajúc z Maxwellovho rozdelenia podľa rýchlosti, neskôr je model vylepšený použitím Bloch-Grüneisenovej funkcie. V závere sú parametre modelu pomocou Nelder-Meadovho algoritmu fitované na experimentálne namerané dáta.

MAGNETICKÉ VLASTNOSTI KOMPOZITU S RÔZNYM OBSAHO M KREMÍKA V NEMAGNETICKEJ ZLOŽKE

Samuel Dobák^{1,*}, RNDr. Ján Fúzer, PhD.¹ (školiťel)

¹ *Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta,
Ústav fyzikálnych vied, Park Angelinum 9, 040 01 Košice*

* E-mail: samuel.dobak@gmail.com

Magneticky mäkké kompozity sú magnetické materiály zložené zo zlisovaného prášku feromagnetických častíc, ktoré sú navzájom oddelené elektroizolačnou vrstvou. K unikátnym vlastnostiam magneticky mäkkých kompozitov patria: izotropné feromagnetické správanie, relatívne vysoká magnetická permeabilita a veľmi nízke straty vírivými prúdmi. Magneticky mäkké kompozity sú využívané pri výrobe generátorov, elektromotorov, transformátorov a súčastí motorov lietadiel, ktoré vyžadujú stabilitu materiálu aj pri vysokých teplotách [1].

Cieľom tejto práce bolo preskúmať komplexnú permeabilitu a magnetické straty pripravených vzoriek magneticky mäkkých kompozitov.

Relatívna komplexná permeabilita je definovaná vzťahom

$$\tilde{\mu}_r = \mu'_r - i\mu''_r, \quad (1)$$

kde $\Re\{\tilde{\mu}_r\} \equiv \mu'_r$ je reálna zložka a $-\Im\{\tilde{\mu}_r\} \equiv \mu''_r$ je záporne vzatá imaginárna zložka relatívnej komplexnej permeability a i je imaginárna jednotka. Feromagnetikum v tvare prstenca s navinutým vinutím možno reprezentovať sériovým náhradným elektrickým obvodom, ktorý pozostáva z rezistora s odporom R_s a cievky s indukčnosťou L_s [2]. Tieto parametre náhradného obvodu sú frekvenčne závislé. Odpor R_s predstavuje straty vznikajúce pri danej frekvencii a je súčtom troch zložiek

$$R_s = R_{\text{vin}} + R_s^{(\text{vin})} + R_s^{(\text{fer})}, \quad (2)$$

pričom R_{vin} je ohmický odpor vinutia, $R_s^{(\text{vin})}$ je stratový odpor reprezentujúci straty vo vinutí a $R_s^{(\text{fer})}$ je stratový odpor reflektujúci straty vo feromagnetiku. Meraním frekvenčných závislostí odporu R_s a indukčnosti L_s feromagnetického prstenca s vinutím možno určiť zložky relatívnej komplexnej permeability vo vzťahu (1) podľa relácií

$$\mu'_r = \frac{L_s}{L_0}, \quad \mu''_r = \frac{R_s^{(\text{fer})}}{\omega L_0}, \quad (3a, 3b)$$

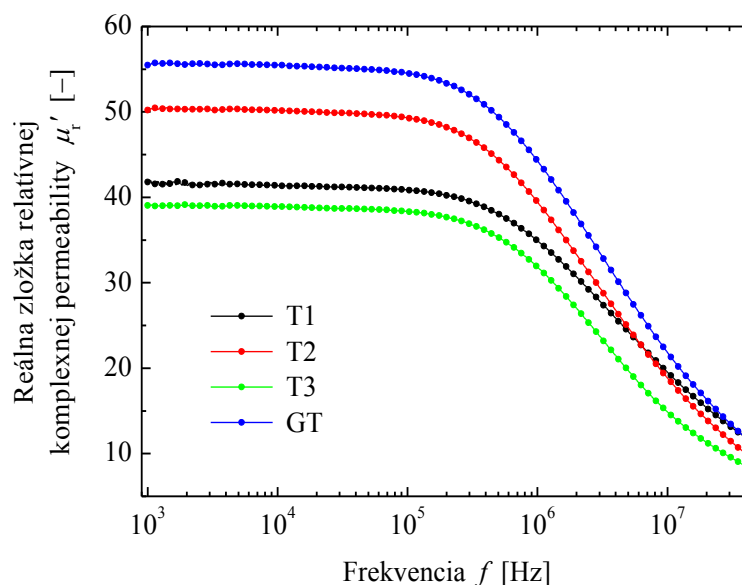
kde ω je uhlová frekvencia a L_0 je indukčnosť prázdneho toroidálneho vinutia bez feromagnetického prstenca, ktorá je funkciou geometrických rozmerov prstenca [3].

Frekvenčné závislosti odporu a indukčnosti prstenca s vinutím boli merané impedančným mostíkom HP 4194A vo frekvenčnom pásme 1 kHz – 40 MHz. Získavanie dát a výpočty zložiek komplexnej permeability boli riadené počítačovým programom, vytvoreným v grafickom programovacom prostredí LabVIEW™, ktorého návrh a realizácia boli súčasťou tejto práce. Kvázistatické hysterézne slučky boli merané hysterezigrafom založeným na integrovaní indukovaného napätia fluxmetrom. Dynamické hysterézne slučky boli merané

nízkofrekvenčným hysterezigrafom MATS-2010M vo frekvenčnom rozsahu 50 Hz – 1 kHz a vysokofrekvenčným hysterezigrafom MATS-2010SA vo frekvenčnom rozsahu 1 kHz – 100 kHz.

V tejto práci boli skúmané štyri vzorky magneticky mäkkých kompozitov obsahujúcich železné častice (97 hm. %), ktoré sú obklopené modifikovanou fenol-formaldehydovou živicom (3 hm. %) vo funkcii izolačnej vrstvy a spojiva. Fenol-formaldehydová živica použitá vo vzorkách T1, T2 a T3 bola modifikovaná rôznym obsahom nanočastíc SiO_2 , ktoré sú zapustené v živici. Vzorka GT obsahovala fenol-formaldehydovú živicu obohatenú chemicky viazaným kremíkom. Hmotnostný obsah kremíka vo vzorkách bol 0,045 hm. % Si (T1), 0,059 hm. % Si (T2), 0,098 hm. % Si (T3) a 0,017 hm. % Si (GT).

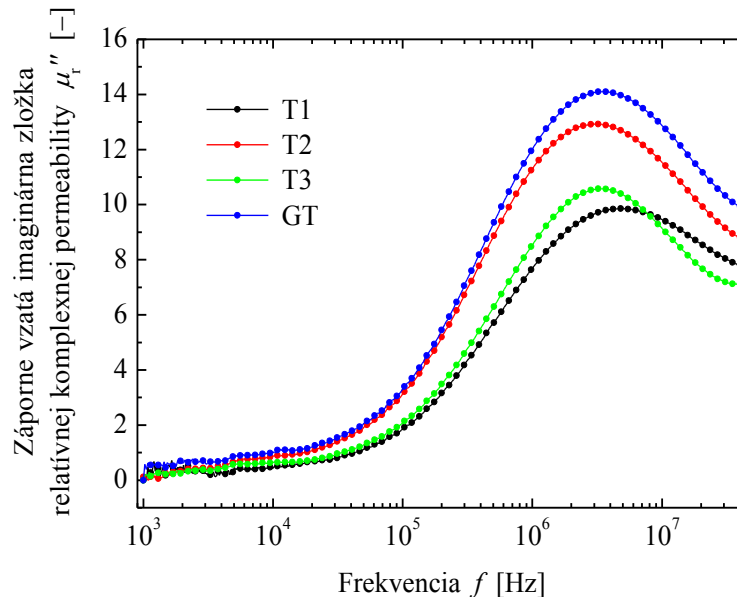
Na obr. 1 sú vyobrazené frekvenčné závislosti reálnej zložky relatívnej komplexnej permeability skúmaných vzoriek, ktoré boli určené použitím vzťahu (3a). Najvyššiu hodnotu reálnej zložky relatívnej komplexnej permeability okolo 55 vykazuje vzorka GT a táto hodnota zostáva konštantná približne do frekvencie 100 kHz, kde dochádza k poklesu reálnej zložky pri všetkých meraných vzorkách. Zo série vzoriek obsahujúcich nanočastice SiO_2 (vzorky T1, T2 a T3) má najvyššiu hodnotu reálnej zložky okolo 50 vzorka T2. Pri určitej frekvencii (okolo 500 kHz) dochádza k poklesu reálnej zložky spôsobenému vírivými prúdmi v časticiach, ktoré vytvárajú magnetické pole opačného smeru ako vonkajšie magnetické pole.



Obr. 1 Frekvenčná závislosť reálnej zložky relatívnej komplexnej permeability skúmaných vzoriek.

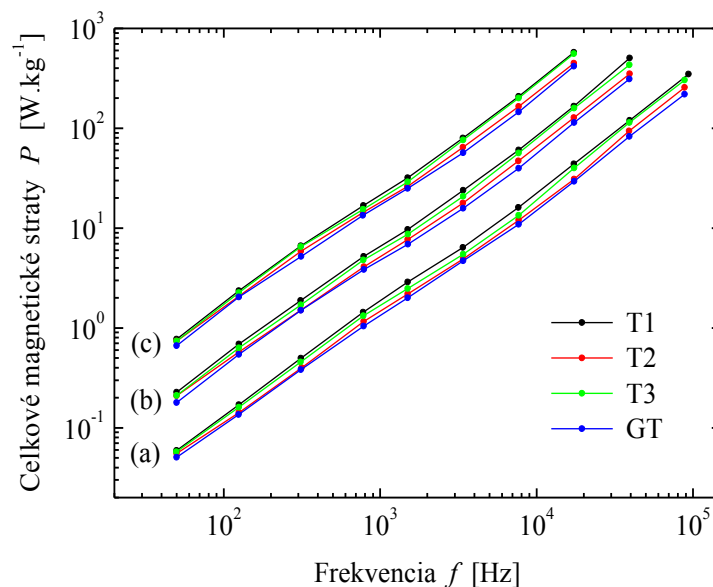
Tenšia vrstva homogénne rozloženého izolačného materiálu vedie k vyššej hustote materiálu s menšou pórovitosťou a menšími vnútornými demagnetizačnými poliami, čo má za následok zníženie hodnoty dodanej energie potrebnej na magnetizačný proces posunu doménových stien a tým vedie k väčšej hodnote permeability.

Zo závislosti záporne vzatej imaginárnej zložky relatívnej komplexnej permeability (na obr. 2) je zrejmy súvis medzi špecifickým elektrickým odporom a relaxačnou frekvenciou kompozitov. Relaxačná frekvencia je frekvencia zodpovedajúca maximu krivky záporne vzatej imaginárnej zložky komplexnej permeability. Nárast špecifického elektrického odporu kompozitu spôsobuje vyššiu hodnotu relaxačnej frekvencie. Vyšší elektrický odpor znižuje vírivé prúdy a tým zvyšuje frekvenčnú stabilitu magnetickej permeability do vyšších frekvencií. Z toho vyplýva aj fakt, že zvyšovanie pórovitosti zvyšuje relaxačnú frekvenciu.



Obr. 2 Frekvenčná závislosť záporne vzatej imaginárnej zložky relatívnej komplexnej permeability skúmaných vzoriek.

Frekvenčná závislosť celkových magnetických strát v jednotkách W.kg^{-1} pri troch rôznych hodnotách maximálnej magnetickej indukcie je znázornená na obr. 3.



Obr. 3 Frekvenčná závislosť celkových magnetických strát skúmaných vzoriek pri maximálnej hodnote magnetickej indukcie (a) $B_{\text{max}} = 0,05 \text{ T}$, (b) $B_{\text{max}} = 0,10 \text{ T}$, (c) $B_{\text{max}} = 0,20 \text{ T}$.

Z meraní frekvenčných spektier komplexnej permeability, hysteréznych slučiek a frekvenčnej závislosti celkových magnetických strát vyplýva, že zo série vzoriek obsahujúcich nanočastice SiO_2 vykazuje najvyššiu hodnotu reálnej zložky komplexnej permeability a najnižšie magnetické straty vzorka T2, čo nasvedčuje tomu, že v rámci živice obohatenej rôznym obsahom nanočastíc SiO_2 existuje optimálne množstvo kremíka, ktoré zapríčiňuje lepšie rozloženie nemagnetickej izolačnej vrstvy živice v kompozite, ktorá pri obaľovaní a lisovaní kompozitu dokáže vytvoriť tenšiu vrstvu schopnejšiu dokonalejšie obaliť častice železa bez vzniku miest s nahromadenou živicom alebo so zhlukom železných častíc obklopených nežiaducimi pórmami.

Najvyššou hodnotou reálnej zložky komplexnej permeability a najnižšími celkovými magnetickými stratami spomedzi všetkých štyroch skúmaných vzoriek sa vyznačuje vzorka GT a to aj napriek faktu, že obsahuje najmenej kremíka v živici. Z toho možno usudzovať, že pri príprave takéhoto druhu kompozitného materiálu je dôležité dosiahnuť chemickú väzbu kremíka a živice, pretože táto spôsobuje homogénne rozmiestnenie kremíka v živici, ktorá následne dosahuje lepšie mechanické vlastnosti súvisiace s jej distribúciou a kvalitou v kompozite. Takto pripravená živica je potom schopná lepšie izolovať feromagnetické častice železa a viac zabraňovať toku vírivých prúdov medzi časticami. Zároveň je použitá fenol-formaldehydová živica, modifikovaná chemicky viazaným kremíkom, rozmiestnená v kompozite homogénne a nevytvára nemagneticke zhluky spôsobujúce zníženie výslednej hodnoty magnetickej permeability kompozitu.

Experimentálne výsledky vedú k záveru, že pri takomto type magnetickej mäkkého kompozitného materiálu je dôležité skúmať vlastnosti nielen magnetickej zložky, ale aj fyzikálne vlastnosti nemagnetickej zložky, ktoré môžu vplývať na výsledné magneticke vlastnosti kompozitu.

Literatúra:

- [1] H. Shokrollahi and K. Janghorban, *J. Mater. Process. Technol.* **189** 1 – 12 (2007).
- [2] M. Dufek a kol. *Magnetická měření Praha* : SNTL, 1964, 404 s.
- [3] M. H. R. Khan and A. K. M. Akther Hossain, *J. Magn. Magn. Mater.* **324** 550 – 558 (2012).

Study of new type of Ti-NT nanotubes

Brunátová Tereza^{1,*}

1. Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Mathematic and Physics, Charles University in Prague

* brunatovat@centrum.cz

Titanate nanotubes (Ti-NT) are relatively new material with many possible applications [1]. For example, in dye-sensitive solar cells Ti-NT, they enhance electron transport to electrode, in biomedical applications Ti-NT grow on titanium bulk orthopedic or dental implants and cells are easily stick on this surface. In composites, Ti-NT can lead to the increase of the Young modulus of polymer to about 35% with respect the normal composite [2]. Structure of Ti-NT is still under discusion. When Ti-NT were synthetized, the first suggested structure was anatase structure of TiO_2 , by Kasuga [3]. After that a lot of articles were published about structure of Ti-NT. Another structure of Ti-NT supposed was the beta phase [4] and the rest of published structures were titanium acids or sodium salts. Possible acids are the following: $H_2Ti_3O_7$ [5], $H_2Ti_3O_7 \cdot H_2O$ [6], $H_2Ti_2O_5 \cdot H_2O$ [7], $H_2Ti_4O_9 \cdot H_2O$ [8]. Sodium ions can be present in the structure of Ti-NT because Ti-NT are created via hydrothermal treatment of TiO_2 powder with NaOH solution. Thus some residual sodium ions could be observed in the structure of Ti-NT.

In this work Ti-NT prepared by hydrothermal treatment of TiO_2 powder with NaOH solution were studied. Two different series of samples were used for structure determination. The structure determination was done by two complementary methods - powder X-ray diffraction and high resolution transmission electron microscopy. As a result, three structure models of Ti-NT were suggested. The first one was based on anatase nanotube. If the (101) surface of anatase is taken the hexagon like structure from Ti atoms can be found. Then anatase nanotubes are described similarly to carbon nanotubes. The second model is based on beta- TiO_2 . This model has more variable parameters. The best values of these parameters were obtained by the least-square method. With this model quite good match was achieved but still not ideal and could not be improved by variations of any of the model parameters. Therefore another model based on structure $H_2Ti_2O_5 \cdot H_2O$ was considered. Theoretical positions of diffraction peaks of this structure also quite well fitted to measured powder X-ray diffraction (PXRD) pattern . The confirmation of this structure was obtained by high resolution transmission electron microscopy. All these models were used to calculate PXRD pattern with aid of the Debye formula. The last model gave the best agreement between the measured and calculated PXRD patterns.

References:

- 1) D. V. Bavykin and F.C.Walsh, Enlogated titanate nanostructure and their applications, European Journal of Inorganic Chemistry, 2009
- 2) D. Kralova et al., Preparation of gram quantities of high-quality titanate nanotubes and their composites with polyamide 6, Mater. Cem. Phys, 2010
- 3) T. Kasuga et. al, Formation of titanium dioxide nanotube, Langmuir, 1998
- 4) G. Armstrong et.al, Nanotubes with the TiO_2 -b structure, Chemical communication, 2005
- 5) S. K. Pradham et al. Atomic-scale structure of nanosized titania and titanates particles, wires and tubes, Chemistry of materials, 2007
- 6) Y. Suzuki and S. Yoshikawa, Synthesis and thermal analysis of TiO_2 -derived nanotubes prepared by the hydrothermal method, Journal of Materials Research, 2004
- 7) Ch.-Ch. Tsai et. al, Mesoporous nanotubes aggregates obtained from hydrothermally treating TiO_2 with NaOH, Applied surface science, 2006
- 8) A. Nakahira et. al, Synthesis of nanotube from layered $\text{H}_2\text{Ti}_4\text{O}_9 \cdot \text{H}_2\text{O}$ in a hydrothermal treatment using various titania sources, Journal of materials science, 2004

AB-INITIO SIMULATIONS OF CHEMICAL STABILITY OF UAM-069 AND ITS RADIATION DEGRADATION PRODUCTS

Koubský Tomáš^{1,*}, Kalvoda Ladislav¹

*1. Department of Solid State Engineering
Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague*

* koubstom@fffi.cvut.cz

Introduction

One of the strategies used for spent nuclear fuel management is the hydrometallurgical treatment of the high level liquid waste (HLLW). It comprises the actinides and lanthanides group separation. In this process the compound UAM-069 (**1** – see figure 1, the notation is adopted from the European project ACSEPT), among others, is used as a cation extractant in apolar solvents. [4]

Since the environment of the process is highly radioactive and acidic in nature (nitric acid), it is necessary to demonstrate the stability of extractant. The degradation leads clearly to undesirable effects caused by decrease of concentration of the original extractant **1**. Unlike the other degradation products, the fragment **3** (figure 1) also acts as an efficient extractant (high distribution coefficients D_{Eu} , D_{Am}). As it is the major degradation product, it is stable to acidic degradation and radiation [4]. Our purpose was to investigate the weak points of the molecules **1** and **3** using the density functional theory (DFT) based ab-initio simulation methods.

Theory

One of the ab-initio computational methods for determining electronic structure in the solid state is the DFT. Here it was used to investigate electronic structure of isolated molecules and to research their chemical stability. The whole theory stands on the theorems of Hohenberg and Kohn (1965) – they tell us about determining some properties of a system of electrons uniquely by the ground state electron density and about possibility to define the system quantities as functionals of the density. The further Kohn-Sham

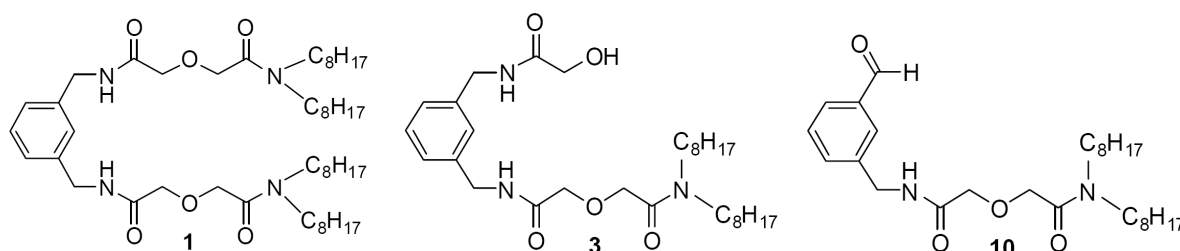


Figure 1: Chemical formulae of UAM-069 – m-xylylene-bis-diglycolamide (**1**) and the degradation products **3** and **10**

ansatz (1965) provides the possibility to replace the difficult many-body system by an auxiliary independent non-interacting particle system in an external ‘effective’ potential and suggests the form of the energy functional. The inter-electronic interaction will be included in the so-called exchange-correlation term. [6] The desired ground state density is then calculated by an iterative process of solving the Kohn-Sham equations – the corresponding representation of Schrödinger equations for the system. The functional form is

$$E_{\text{KS}} = T[\rho] + \int d\mathbf{r} V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + E_{\text{Hartree}}[\rho] + E_{\text{li}} + E_{\text{xc}}[\rho]$$

$T[\rho]$ is the kinetic energy of noninteracting electrons, $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ is the external potential due to the nuclei, $E_{\text{Hartree}}[\rho]$ is the electron repulsive energy and E_{li} is the nuclei repulsive energy. The last term, $E_{\text{xc}}[\rho]$, is the crucial exchange-correlation energy. [6]

Since the decay of the UAM-069 takes place in the acidic environment, we have to take in account the high concentration of H^+ ions. The gamma irradiation mainly causes the dissociation of the water and acid molecules and increases the concentration of H^+ ions. Therefore the role of radiolytic decay is played by the electrophilic attack, not the radical attack as conventionally considered. [4] When we are going to investigate the regioselectivity of the electrophilic decomposition, we use the regioselective indicators referring to the loss of electron. These are the electrophilic Fukui function with its condensed values, the negative extremes of the electrostatic potential (ESP), the local atomic charges, the chemical hardness and the density and localization of the highest occupied molecular orbital (HOMO).

The Fukui function was defined by Yang and Parr (1984) as the first derivative of the electronic density $\rho(\mathbf{r})$ by the number of the particles N . Since the N is an integer, the function is ill-defined and we obtain two one-side derivatives. The electrophilic Fukui function $f^-(\mathbf{r})$ is defined as the left derivative: $f^-(\mathbf{r}) = \left(\frac{\partial \rho(\mathbf{r})}{\partial N} \right)_{V(\mathbf{r})}^- = \rho_N(\mathbf{r}) - \rho_{N-1}(\mathbf{r})$, where the second identity results from the Maxwell relations and the potential $V(\mathbf{r})$ is constant. [3]

According to Yang and Parr REF, at the point of the highest $f^-(\mathbf{r})$, the molecule is most likely to lose an electron and therefore it describes the susceptibility to an electrophilic attack. [9]

The volumetric ESP data are calculated in a standard way from the electron density: $\Phi(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + \sum_i \frac{Z_i}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}$, where the Z_i and the \mathbf{r}_i are the charges and locations of the effective nuclei.

In the frontier molecular theory [5] it is expected that in a chemical reaction, high activity occurs between the highest occupied molecular orbital (HOMO) of the one and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) of the other molecule. Consequently the presence of HOMO means the possibility of electron loss and thus the reactivity. The HOMO-density $\rho_N^{\text{HOMO}}(\mathbf{r})$ is related to the $f^-(\mathbf{r})$ in the ‘frozen orbital approximation’ by the identity $f^-(\mathbf{r}) = \rho_N^{\text{HOMO}}(\mathbf{r})$. [2]

The chemical hardness η was defined in 1983 by Pearson and expresses ‘the stability of electron distribution against the polarization’. [9] Within the limitations of Koopman’s theorem and in the finite difference approximation, we can set it to be proportional to the HOMO-LUMO gap ($\Delta E = E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}$). [7] The important sense of chemical hardness for us is that it acts as an identifier of the indicators’ priority. According to [3], in the ‘charge-controlled’ reactions (reactions of hard acids and hard basis), the ESP acts as a primary indicator of the chemical stability before the HOMO-density and $f^-(\mathbf{r})$.

Computational section

According to the work of Galán et al. [4], the molecule **1** (UAM-069) is unstable in the acidic and radioactive environment. Out of the variety of degradation products we have chosen to simulate the molecule **1** and the fragments **3** and **10** (see the figure 1, the notation is adopted from [4]). Since the diglycolamide group of **1** causes the high distribution coefficients for Eu and Am, we have chosen molecules containing this group. The proposed location of the weak point of **1** is on the ether oxygen, as can be seen from the structure of the major degradation product **3**. According to [4], **3** shows higher stability in the radioactive environment in the contrary to **1** while keeping the high values of distribution coefficients ($D_{Eu} \approx 600$, $D_{Am} > 1000$). In addition, **3** is more stable although it contains the ether group as well. The fragment **10** was chosen for comparison – it is less stable while the structure is not so different from **3**.

Now let's focus on computing the chemical regioselectivity indicators. Since the decay is a 'charge controlled' reaction (the investigated molecules are very hard donors: $\Delta E \approx 0.1 \text{ Ha} \doteq 2.7 \text{ eV}$), the ESP is the primary indicator of chemical stability.

The results of ESP show the band of negative extremes between the atoms carbonyl-ether-carbonyl. Together with the quantitative extreme of the computed local atomic charge on the ether oxygen, this supports the suggestion of the ether group being the weak point in [4]. This we can say considering only the first level of indicators, because these results don't differ for the diglycolamide groups of all the molecules **1**, **3** and **10** and thus it does not prove anything about the difference in chemical stability. For the difference between them, we have to consider also the secondary indicators.

The Fukui function $f^-(\mathbf{r})$ shows nothing more than the above mentioned. More interesting results are given by the location of the HOMO. As we can see in the figures 2(a) and 2(c), the orbital is localized in the area of amide and carbonyl, near the ether oxygen, for the molecules **1** and **10**. For **3** (figure 2(b)), the difference can be clearly seen – the HOMO is highly delocalized over the other arm of the molecule. Here the results for the BLYP functional are present. Results for the other functionals slightly differ, but the delocalization effect is obvious and mutual. Since the HOMO orbital is the one which directly takes part in chemical reactions [2], the mentioned results support the localized weak point around the ether atom for **1** and **10** and the lower localization (and thus higher stability) for **3**.

For the computations the software packages Materials Studio 5.5 and 6.0 (Accelrys Software Inc.) with the DFT-based module MS DMol³ were used. For the electron density the DNP 3.5 numerical basis set was used (double-numeric set plus polarization functions) with spin-polarized orbitals and global cutoff value 0.37 nm. As the XC-functionals the generalized gradient-corrected functionals PBE, RPBE and BLYP were used. The

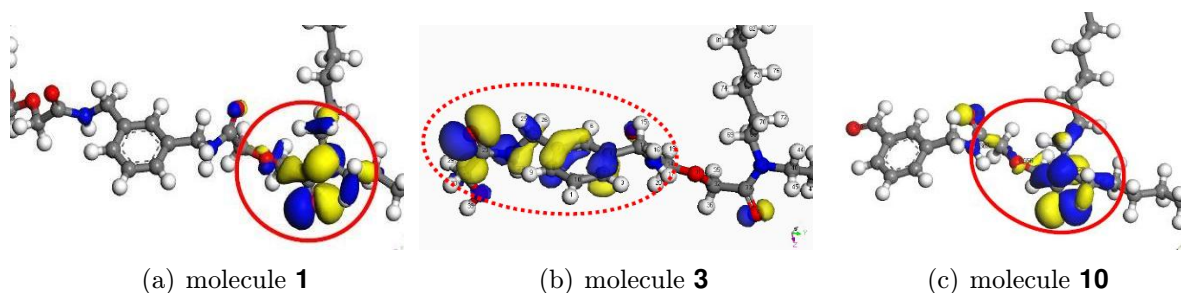


Figure 2: HOMO-density by the BLYP functional – isosurface at the isovalue $0.03 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$

function f^- was obtained by numerical differentiation ($\Delta N = 0.1e$), the local charges and the atomic f^- were computed by Mullikan population analysis [8]. For the details see [1].

Conclusion

Chemical stability and regioselectivity of the molecules **1**, **3** and **10** participating in the chemical extraction treatment of the nuclear waste were investigated. For this purpose the volumetric quantities ESP, f^- and HOMO-density were computed with the corresponding condensed values and energetic levels of HOMO and LUMO. By the results of ESP the reactivity of the ether atom was shown to agree with the role proposed in [4]. To explain the differences in stability between **1** and **3**, the secondary indicator (HOMO-density) was used; the obtained results have been found to agree well with the experimental data.

The further research will be carried out to include the computation of other XC-functionals in order to unify the slightly different results of HOMO. Also the molecular dynamics simulation (force-field methods) could show other geometric conformation of the investigated molecules and thus provide other possibilities of the degradation process.

References

- [1] Accelrys Software inc., 2009, *Materials Studio online help, Release 5.0.1*, Accelrys Software Inc., San Diego.
- [2] Anderson, J. S. M., Melin, J., Ayers, P. W., 2007, Conceptual Density-Functional Theory for General Chemical Reactions, Including Those That Are Neither Charge- nor Frontier-Orbital-Controlled. 1. Theory and Derivation of a General-Purpose Reactivity Indicator, *J. Chem. Theory Comput.*, 3(2), 358-374.
- [3] Chattaraj, P. K., 2009, *Chemical Reactivity Theory: A density functional view*, CRC Press, Boca Raton.
- [4] Galán, H., Murillo, M. T., Sedano, R., Núñez, A., de Mendoza, J., González-Espartero, A., Prados, P., 2011, Hydrolysis and Radiation Stability of m-Xylylene Bis-diglycolamide: Synthesis and Quantitative Study of Degradation Products by HPLC–APCI⁺, *Eur. J. Org. Chem.*, 2011, 3959–3969.
- [5] Leach, A. R., 2001, *Molecular modelling: principles and applications* (Vol. 2), Prentice Hall, Harlow.
- [6] Martin, R. M., 2004, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, New York.
- [7] Pearson, R. G., 2005, Chemical hardness and density functional theory, *J. Chem. Sci.*, 117(5), 369-377.
- [8] Saha, S., Roy, R. K., Ayers, P. W., 2009, Are the Hirshfeld and Mulliken population analysis schemes consistent with chemical intuition?, *Int. J. Quantum Chem.*, 109, 1790–1806.
- [9] Yang, W., Parr, R. G., 1985, Hardness, softness, and the fukui function in the electronic theory of metals and catalysis, *Proc. Nati. Acad. Sci. USA*, 82, 6723-6726.

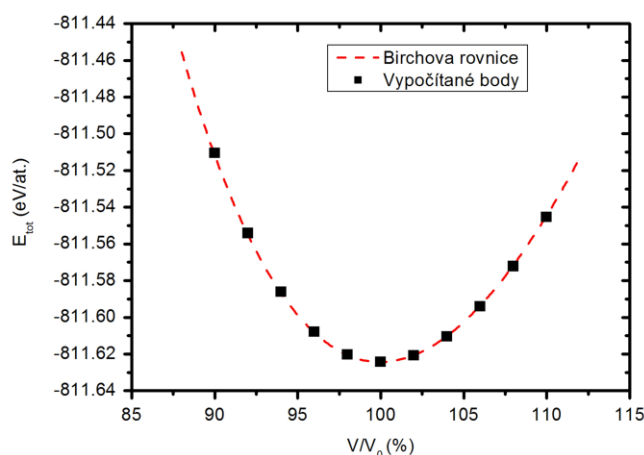
VLASTNOSTI A ELEKTRONOVÁ STRUKTURA NITRIDŮ PŘECHODOVÝCH KOVŮ

Vít Petrman

Katedra fyziky, Západočeská univerzita v Plzni, Univerzitní 22, 30614, Plzeň

vpetrman@students.zcu.cz

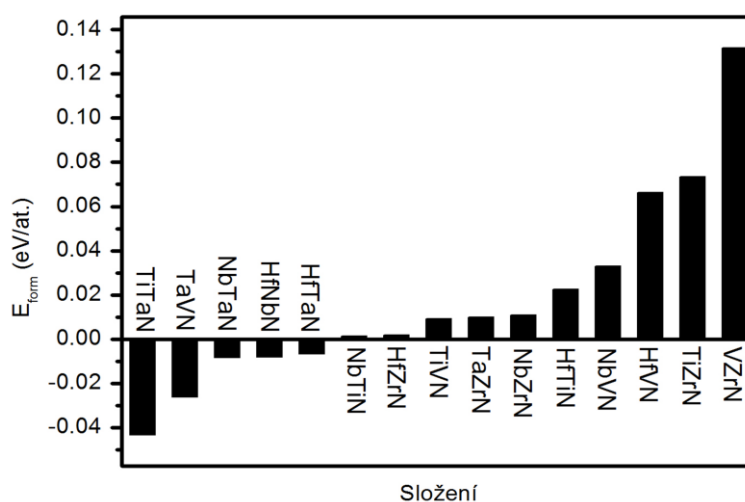
Binární nitridy přechodových kovů v současnosti nachází díky svým unikátním fyzikálním vlastnostem uplatnění v široké škále oborů [1-4] a v posledních letech vzrostl zájem o tuhé roztoky a nanokompozity těchto nitridů, které by vzájemnou kombinací jejich vlastností dále



Obr. 1: Závislost energie systému E_{tot} na objemu primitivní buňky. Body reprezentují hodnoty získané simulací a přerušovaná křivka pak závislost získanou z Birchovy rovnice.

derivace B_0' , bylo použito metody, kdy se vytvoří buňky v rozmezí 10-20% od předpokládaného rovnovážného objemu $V_{předp.}$ (v této práci 90-110% $V_{předp.}$ s krokem 2%). Pro všechny tyto buňky byla výpočtem zjištěna celková energie a hodnoty hledaných veličin byly pomocí metody nejmenších čtverců získány z Birchovy rovnice (viz Obr. 1). Pro výpočet elastických modulů byla základní buňka deformována

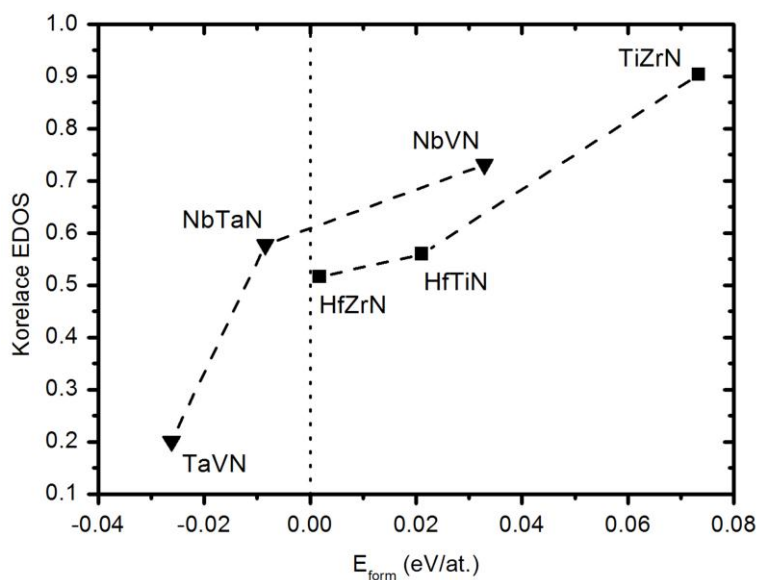
zlepšily, a bylo by možné tyto materiály připravovat na míru jejich aplikacím. Tato práce se věnuje systematickému studiu nitridů přechodových kovů IV B a V B skupiny a jejich vlastností pomocí *ab-initio* simulace s použitím programu PWscf (Plane Wave self-consistent field) [5]. Mezi hlavní studované vlastnosti patří formovací energie, elastické moduly a elektronová struktura. K určení první skupiny veličin, konkrétně rovnovážné energie systému E_0 , objemu primitivní buňky V_0 , modulu tuhosti B_0 a jeho



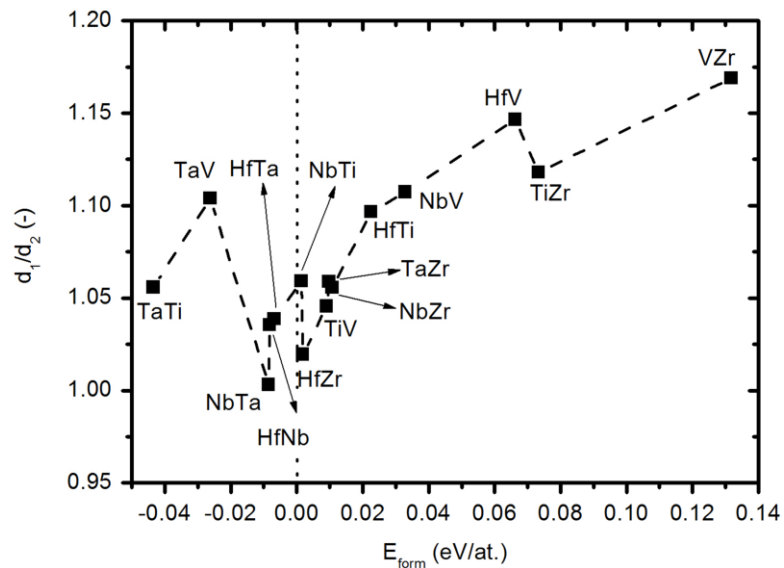
Obr. 2: Formovací energie E_{form} jednotlivých ternárních nitridů, která ukazuje na tvorbu tuhých roztoků (záporné hodnoty vlevo) nebo segregaci (kladné vpravo).

transformací primitivních vektorů a následně optimalizována vlnová funkce pro zajištění minimální celkové energie systému v deformovaném stavu. Tímto způsobem lze získat všechny nezávislé elastické konstanty C_{ij} . V této práci je pro deformaci tetragonální buňky použito šest zatížení, která byla převzata z práce M. J. Mehla [6]. Při zatěžování kubické buňky stačilo z šesti vybrat vhodná tři zatížení (viz nezávislé

elastické konstanty). Z těchto hodnot byly určeny mezí hodnoty modulu tuhosti, horní mez dle Voigta (B_{Voigt}) a dolní dle Reusse (B_{Reuss}), stříhový modul G a Youngův modul E . Po získání všech požadovaných veličin pro binární nitridy bylo možné stejné výpočty provést pro ternární systémy. Nejprve formovací energie (viz Obr. 2), ze kterých je možné usuzovat, které nitridy budou tvořit tuhé roztoky a u kterých bude zřejmě docházet k segregaci jednotlivých



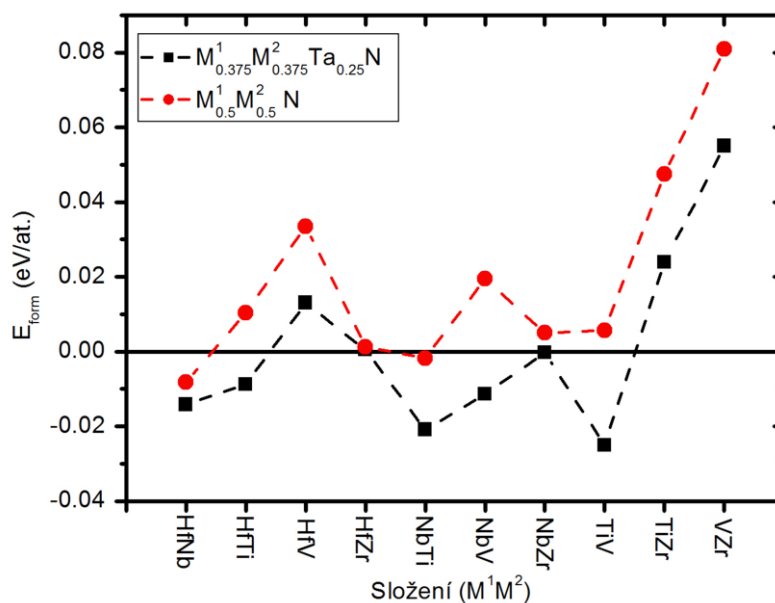
Obr. 4: Závislost (i) hustoty elektronových stavů v nejvyšším obsazeném pásu ve dvou různých binárních nitridech na (ii) formovací energii příslušného ternárního nitridu E_{form} . Je překvapivé, že čím větší korelace, tím menší tendence tvořit tuhý roztok.



Obr. 3: Porovnání průměrů kovových atomů (d_1/d_2) v ternárních systémech v závislosti na formovací energii E_{form} .

složek. Další graf (Obr. 3) zobrazuje závislost poměru průměrů kovových atomů ternárních nitridů v závislosti na formovací energii. Z obrázku a znalosti elektronegativit těchto kovů vyplývá, že pro prvky s rozdílnou elektronegativitou (i) se v případě podobné velikosti atomů formovací energie pohybují v okolí nuly, zatímco (ii) pro rozdílné velikosti atomů vyšší hodnoty formovacích energií naznačují tendenci k segregaci. V případě podobných hodnot elektro-negativit obou kovů platí, že (iii) pro podobně velké atomy jsou hodnoty formovacích energií výrazně

záporné (TiTaN) nebo blízké nule, zatímco (iv) případě rozdílné velikosti kovových atomů mohou být formovací energie velmi záporné (VTaN) i velmi kladné. Dále bylo zjištěno, že přidáním tantalu do ostatních ternárních nitridů lze snížit formovací energie (s výjimkou HfZrN, kde se tato energie nezmění) a tím přispět k mísitelnosti zmíněných systémů (viz Obr. 5). Zajímavé výsledky poskytly také výpočty elektronové struktury. Při porovnání korelace hustoty elektronových stavů (EDOS) v nejvyšším obsazeném pásu příslušných binárních nitridů bylo zjištěno, že s rostoucí korelací překvapivě roste i formovací energie, tj. tendence k segregaci binárních složek. V grafu je srovnáváno pouze zobrazených šest nitridů, neboť je v tomto případě možné srovnávat pouze složení se stejným počtem elektronů. Výpočty mechanických vlastností ternárních nitridů a v době odesílání abstraktu stále běží, proto budou uvedeny až v samotné práci a též předneseny při prezentaci.



Obr. 5: Vliv přidání tantalu na formovací energii E_{form} ternárních nitridů. Je patrný pokles pro všechna složení (s výjimkou HfZrN), což naznačuje možnost zlepšit mísitelnost ternárních nitridů pomocí tantalu.

Literatura:

1. J. Musil, *Surf. Coat. Technol.* **125** (2000) 322.
2. M. Takeyama, A. Noya, T. Sase, A. Ohta, K. Sasaki, *J. Vac. Sci. Technol. B.* **14** (1996) 674.
3. Y. Okazaki, Y. Ito, K. Kyo, T. Tateishi, *Mat. Sci. Eng. A.* **213** (1996) 138.
4. O. Knotek, W.D. Munz, T. Leyendecker, *J. Vac. Sci. Technol. A.* **5** (1987) 2173.
5. P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **21**, (2009) 395502.
6. M.J. Mehl, B.M. Klein, D.A. Papaconstantopoulos, *Intermetallic Compounds: Principles and Practice*, John Wiley and Sons, 1994, London.

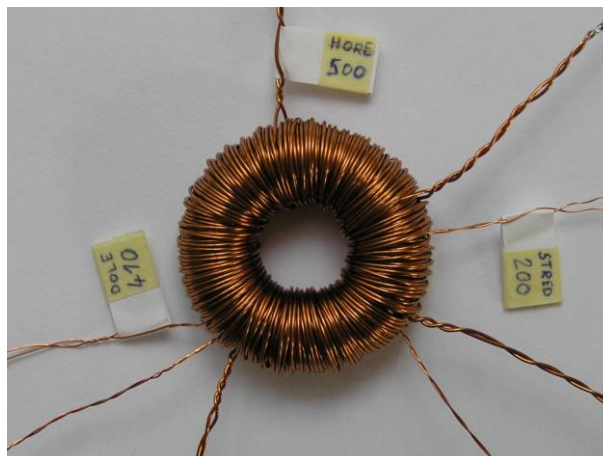
VPLYV VNÚTORNÉHO DEMAGNETIZAČNÉHO POĽA NA MAGNETICKÉ VLASTNOSTI MAGNETICKY MÄKKÝCH KOMPOZITOV

Vojtek Vladimír^{1,*}, prof. RNDr. Kollár Peter, CSc. (vedúci)¹,
Mgr. Birčáková Zuzana (konzultantka)¹

1. ¹ Katedra fyziky kondenzovaných látok, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika,
Košice 041 80, Slovakia

* autor_vojtek.vlado@gmail.com

V súčasnej modernej dobe sa venuje veľký záujem modernizácii a vývoju používaných materiálov v oblastiach elektrotechniky, elektroniky, počítačov, či telekomunikácií, pričom z dôvodu vyťaženia energetických zdrojov, environmentálnych hrozieb a zhoršujúcej sa ekonomickej situácie sa v spomínaných oblastiach vývoja kladie dôraz najmä na úsporu energie. V posledných desaťročiach tak v daných aplikáciách vzrástol záujem najmä o magneticky mäkké kompozitné materiály, ktoré vykazujú jedinečné magnetické vlastnosti. Ide o látky zložené z malých feromagnetických častíc navzájom oddelených elektricky izolačnou vrstvou [1]. Po vložení telesa z magneticky mäkkého kompozitného materiálu do magnetického poľa platí, že intenzita jeho vnútorného magnetického poľa je vždy menšia ako intenzita vonkajšieho magnetického poľa. Príčinou sú demagnetizačné polia, ktoré vznikajú pri vložení feromagnetického telesa neuzavretého tvaru do magnetického poľa, a teda každá častica kompozitu sa stáva zdrojom demagnetizačných polí. Veľkosť demagnetizačného poľa je daná hodnotou demagnetizačného faktora, pričom pri kompozitných materiáloch sa rozlišuje jeho vonkajšia zložka daná tvarom telesa a vnútorná zložka určená tvarom častíc a objemovým zastúpením feromagnetických častíc, t. j. hodnotou súčiniteľa plnenia [2-4]. Z tohto dôvodu bola v tejto práci skúmaná trojica prstencových vzoriek magneticky mäkkého kompozitného materiálu (Obr. 1) s označením S, A a B, pričom cieľom bolo preskúmať súvis vnútorného demagnetizačného poľa s inými magnetickými vlastnosťami. Vzorka S predstavovala referenčný materiál. Bola zhotovená z prášku Somaloy® 700 a pripravená výrobcem vyvinutou technológiou. V porovnaní so zvyšnou dvojicou vzoriek zároveň vykazovala najvyššiu hodnotu súčiniteľa plnenia. Vzorky A a B boli vyrobené navzájom rovnakým postupom a z rovnakých zložiek, pričom ako magnetický materiál bol použitý železný prášok ASC 100.29 a ako izolačná hmota fenol-formaldehydová živica (Bakelit ATM). Vzorka A sa však odlišovala vyššou hodnotou súčiniteľa plnenia ako vzorka B. Lisovaním vzoriek do tvaru prstenca, ktorý predstavuje uzavretý magnetický obvod bolo možné celkový demagnetizačný faktor týchto vzoriek eliminovať len na jeho vnútornú zložku. Rôznym objemovým zastúpením



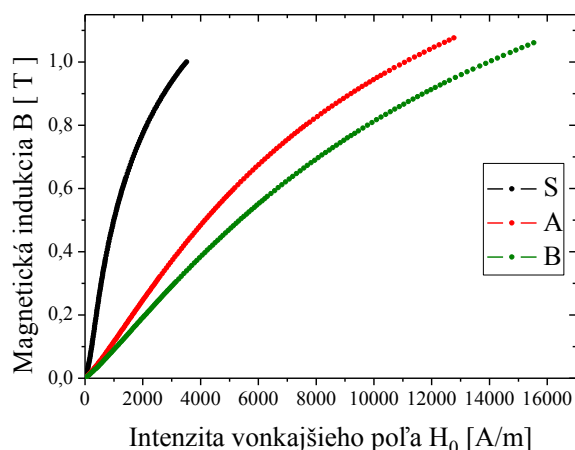
Obr. 1 Prstencová vzorka magneticky mäkkého kompozitného materiálu s navinutým vinutím.

feromagnetickéj zložky v jednotlivých prstencoch boli navyše získané vzorky s rôznou hodnotou vnútorného demagnetizačného faktora.

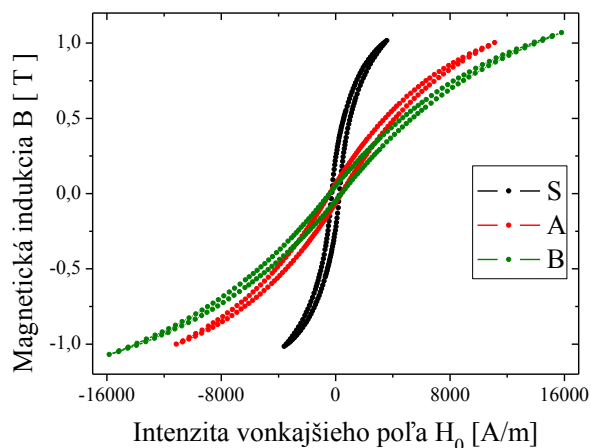
Po zmeraní a analýze kriviek prvotnej magnetizácie zobrazujúcich priebeh magnetickej indukcie od intenzity vonkajšieho magnetického poľa bolo potvrdené, že s klesajúcou hodnotou súčiniteľa plnenia dochádza k nárastu vnútorného demagnetizačného faktora, nakoľko namerané krivky jednotlivých vzoriek sa navzájom líšili svojím sklonom (Obr. 2). Z týchto kriviek boli vyčíslené hodnoty počiatkovej a maximálnej magnetickej relatívnej permeability a Rayleighho konštanty pre každú skúmanú vzorku.

Súčasne boli experimentálne zmerané kvázistatické hysterézne slučky do rôznych hodnôt maximálnej magnetickej indukcie, zobrazujúce rovnako závislosť magnetickej indukcie od intenzity vonkajšieho magnetického poľa (Obr. 3). Z týchto slučiek boli vypočítané hodnoty remanentnej magnetickej indukcie, koercitívneho poľa a hysteréznych strát.

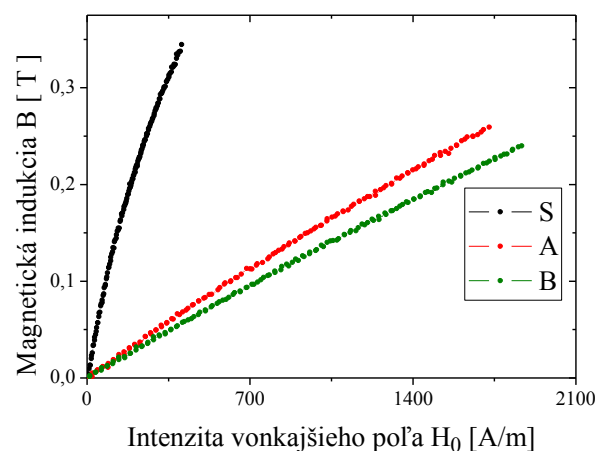
Následne boli určené hodnoty vnútorných demagnetizačných faktorov skúmaných vzoriek. V prvom priblížení boli nájdené ich horné ohraničenia, pričom sa vychádzalo z predpokladu, že aplikované magnetické pole sa v najvyššej možnej miere využije na tvorbu demagnetizačného poľa. Ďalej sa postupovalo dvoma spôsobmi. Pri prvej metóde bol použitý empiricky získaný vzťah, umožňujúci tento výpočet na základe hodnoty súčiniteľa plnenia [3]. Takto získané výsledky však výrazne prevyšovali svoje maximálne prípustné hodnoty, čo jednoznačne vylučuje ich správnosť. Druhý spôsob bol založený na odčítaní uhla odklonu experimentálne nameraných anhysteréznych kriviek (Obr. 4) od vodorovnej osi súradnicového systému v ich počiatkovej oblasti, kde tieto krivky



Obr. 2 Krivky prvotnej magnetizácie zobrazujúce priebeh magnetickej indukcie od intenzity vonkajšieho magnetického poľa pre vzorky S, A a B.



Obr. 3 Hysterézne slučky zobrazujúce priebeh magnetickej indukcie od intenzity vonkajšieho magnetického poľa pre vzorky S, A a B.



Obr. 4 Anhysterézne krivky umožňujúce určenie hodnôt vnútorných demagnetizačných faktorov pre vzorky S, A a B.

vykazujú lineárny priebeh. Takto získané hodnoty boli podstatne menšie ako hodnoty pri prvom postupe a zároveň neprevyšujúce svoje horné ohraničenie. Táto skutočnosť nižších reálnych hodnôt vnútorných demagnetizačných faktorov, voči ich predpokladaným hodnotám môže byť spôsobená nerovnomerným rozptýlením feromagnetických častíc v kompozitnom materiáli. Výsledne spracované vzorky totiž pravdepodobne obsahujú pomerne veľké vzduchové bubliny nepravidelne rozložené vo vzorke, v okolí ktorých vznikajú početné zhluky feromagnetických častíc, čo spôsobuje ich silnejšiu magnetickú interakciu, vysúvanie magnetických pólov na okraj daného zhluku a následne elimináciu demagnetizačných efektov. Prítomnosť vzduchových bublín v kompozite je tak z hľadiska rovnomerného rozloženia zložiek vo vzorkách a numerického výpočtu vnútorných demagnetizačných faktorov nežiaduca, naopak z hľadiska minimalizácie rozptylových polí zohráva priaznivú úlohu.

Na záver bolo na základe získaných hodnôt vnútorných demagnetizačných faktorov možné skonštruovať magnetizačné krivky zobrazujúce priebeh magnetickej indukcie od intenzity vnútorného magnetického poľa. U týchto kriviek boli sledované rovnaké fyzikálne veličiny ako u nameraných kriviek, pričom ich vzájomným porovnaním bolo definitívne potvrdené, že rastúca hodnota vnútorného demagnetizačného faktora spôsobuje premenu väčšej časti vonkajšieho magnetického poľa na pole demagnetizačné, v dôsledku čoho sa do vnútra vzorky dostáva reálne menšia časť aplikovaného magnetického poľa. Reakcia látkového prostredia na vonkajšie magnetické pole je tak slabšia, čo spôsobuje pokles hodnoty magnetickej permeability a Rayleighho konštanty. Zároveň klesá hodnota remanentnej magnetickej indukcie, zatiaľ čo hodnota koerzitívneho poľa a hysteréznych strát ostáva s meniacim sa demagnetizačným poľom nezmenená.

Zoznam použitej literatúry:

- [1] H. Shokrollahi and K. Janghorban, J. Mater. Process. Technol. **189** 1-12 (2007)
- [2] V. Hajko a L. Potocký, Fyzika magnetických javov 496 s. (1973)
- [3] M. Anhalt, B. Weidenfeller and J.-L. Mattei, J. Magn. Magn. Mater. **320** e844-e848 (2008)
- [4] J.-L. Mattei and M. Le Floch, J. Magn. Magn. Mater. **257** 335-345 (2003)

ELECTRON INDUCED FLUORESCENCE OF METHANE

Ribar Anita

*Dept. of Experimental Physics, Comenius University,
Mlynská dolina F-2, 842 48
anita.ribar@gmail.com*

Electron induced fluorescence (EIF) is a series of processes when an atom or a molecule is excited by the collision with an electron and subsequently emits a photon during the deexcitation. For experimental measurements of such reactions crossed beams experimental method is suitable. The electron beam collides with a beam of molecules. In our experiment we have focused on the EIF of methane. Methane is present in wide variety of plasmas. Its investigation can help in understanding of elementary processes occurring in presence of low energy electrons in atmospheric, thermonuclear plasma, and also gives information on plasma dynamics.

Aarts et al. [1] published a paper on radiation of methane fragments. Beenakker et al. [2] were investigating small hydrocarbons, among which methane was as well. They determined the threshold energies of fragments. Radiation from the same fragments as in methane was investigated in paper aimed at electron impact of isoxazole [3] or furan [4].

Using the experimental apparatus described in [5] we are able to obtain results with higher accuracy than in previous studies.

The energetically highly resolved electron beam is generated by trochoidal electron monochromator and the perpendicular molecular beam is produced by effusive capillary. The collision of electron with a molecule of methane leads to electronic excitation. Such an excited molecule is unstable and dissociates into several excited fragments. These can subsequently deexcitate by photon emission. The observed radiation transitions are Balmer's series H_α (3-2) up to H_η (9-2), CH fragments $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$, $B^2\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ and $C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$, CH^+ $B^1\Delta \rightarrow A^1\Pi$ and CI transition $3s^1P^0 \rightarrow 2p^2^1S$. Some of them are marked in the spectrum (Fig. 1).

In the first phase of the investigation we measured the emission spectrum using an electron beam with constant energy. In the Figure 1 the peaks represent specific transitions, corresponding to Balmer's series, CH fragments, CH^+ ions and atomic transition of carbon. The rotational lines of the P, Q and R branches of the $CH(A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi)$ (0,0) in the region from 410nm to 450nm wavelength can be seen. They were identified by Zubek et al. as well.[6] Emission spectra were measured at different electron energies (100eV, 85eV, 70eV, 50eV, 40eV) and the height of peaks varied. This was due to the fact that the probability of specific transition depends on the energy of the electron beam.

The second mode of electron induced fluorescence measurement is EIF cross section determination by changing the electron energy during the measurement, while wavelength of the detected light is permanently the same. Cross sections were determined for all of the detected fragments in methane emission spectrum measured by previously described method.

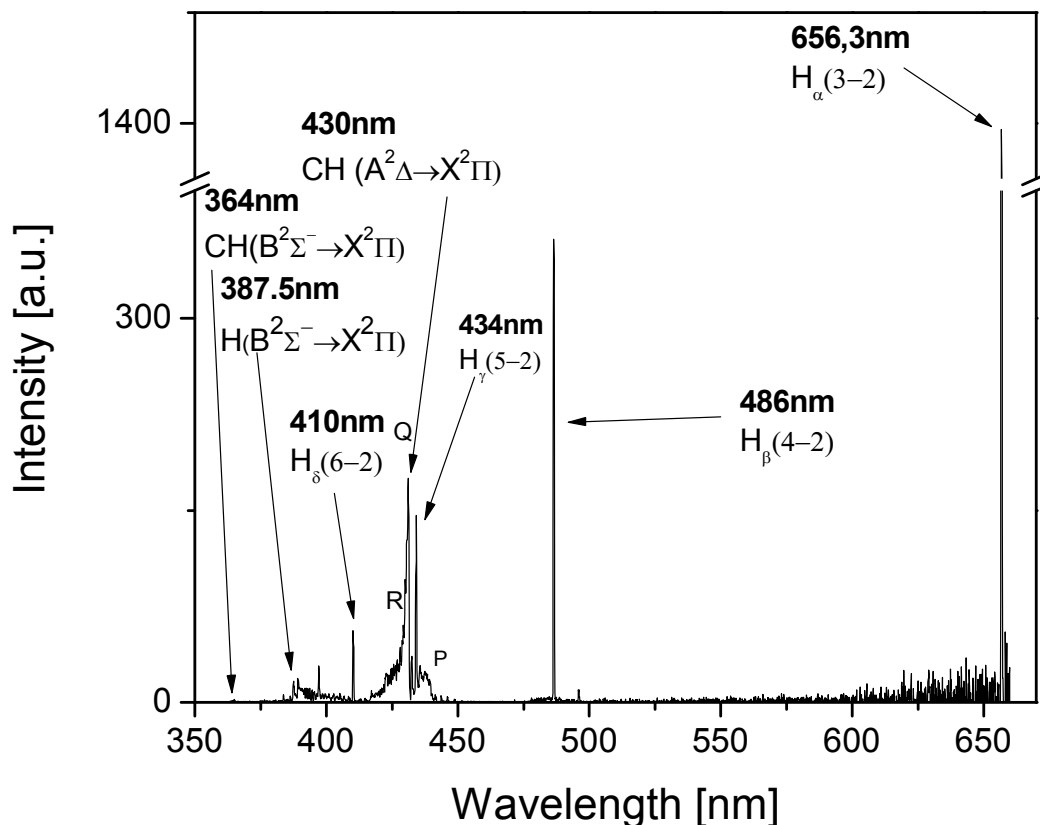


Fig. 1. The emission spectrum of methane after the collision with electron beam with energy of 70e

After the measurement of collision cross sections at the exact wavelength that corresponds to one of the transitions the threshold energy was determined. Then we compared our results from all observed transition measurements with the results collected by other authors [1][7][8], which is represented in Table 1 and Table 2.

Fragment	Transition	Wavelength (nm)	Threshold energy (eV)			
			Present	Motohashi	Aarts	Donohue
H	H _α (3-2)	656.9	20.1	20.2	21.9±0.5	
H	H _β (4-2)	486.4	19.6	20.5	21.8±0.5	22
H	H _γ (5-2)	434.2	21.03	20.7	22.3±0.5	22.6
H	H _δ (6-2)	410.1	20.5	21		
H	H _ε (7-2)	397.1	20.66			
H	H _ζ (8-2)	389.2	20.7			
H	H _η (9-2)	383.7	24.3			

Table 1. Data concerning the threshold energies of measured transitions within Balmer series measured by our group and compared with other authors measurements [1][7][8]

Fragment	Transition	Wavelength (nm)	Threshold energy (eV)			
			Present	Motohashi	Aarts	Donohue
CI	$3s^1P^0 \rightarrow 2p^2^1S$	248.2	24.1			
CH	$A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$	430.9	12.96	14.2	14.6	13.4
CH	$B^2\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$	387.5	14.05			
CH	$C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$	314.5	17.35			13.9
CH ⁺	$B^1\Delta \rightarrow A^1\Pi$	350.2	31.35			31.6

Table 2. Data concerning the threshold energies of measured transitions of methane fragments series measured by our group and compared with other authors measurements[1][7][8]

Some of the transitions were not measured before but due to the high sensitivity of our apparatus, cross sections and threshold energies were determined for H(6,7,8,9-2) and CH $B^2\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ (314.5nm) transitions.

References:

- 1) Aarts J.F.M., Beenakker C.I.M., and De Heer F.J.: Radiation from CH₄ and C₂H₄ produced by electron impact, *Physica* 53, 32-44 (1971)
- 2) Beenakker C.I.M., and De Heer F.J.: Dissociative excitation of some aliphatic hydrocarbons by electron impact, *Chemical Physics* 7, 130-136 (1975)
- 3) Linert I., Lachowicz I., Wasowicz T.J., Zubek M.: Fragmentation of isoxazole molecules by electron impact in the energy range 10-85eV, *Chemical Physics Letters* 498, 27-31 (2010)
- 4) Dampc M., Zubek M.: Dissociation and fragmentation of furan by electron impact, *International Journal of Mass Spectrometry* 277, 52-26 (2008)
- 5) Országh, J., Danko, M., Ribar, A., Matejčík, Š.: Nitrogen second positive system studied by electron induced fluorescence, *Nucl. Instr. Meth. B* 279, 76-79 (2012)
- 6) Tomasz J. Wasowicz, Antti Kivimaki, Marcin Dampc, Marcello Coreno, Monica de Simone and Mariusz Zubek, Photofragmentation of tetrahydrofuran molecules in the vacuum-ultraviolet region via superexcited states studied by fluorescence spectroscopy, *PHYSICAL REVIEW A* 83, 033411 (2011)
- 7) K. Motohashi, H. Soshi, M. Ukai, S. Tsurubuchi, Dissociative excitation of CH₄ by electron impact: Emission cross sections for the fragment species, *Chem. Phys.* 213, 369-384 (1996)

- 8) D. E. Donohue, J. A. Schiavone, and R. S. Freund, Molecular dissociation by electron impact: Optical emission from fragments of methane, ethylene, and methanol, *J. Chem. Phys* 67, 769-780 (1977)

Antioxidačné enzýmy, oxidačné poškodenie významných biomolekúl a nový zápalový marker kalprotektín u pacientov so psoriázou

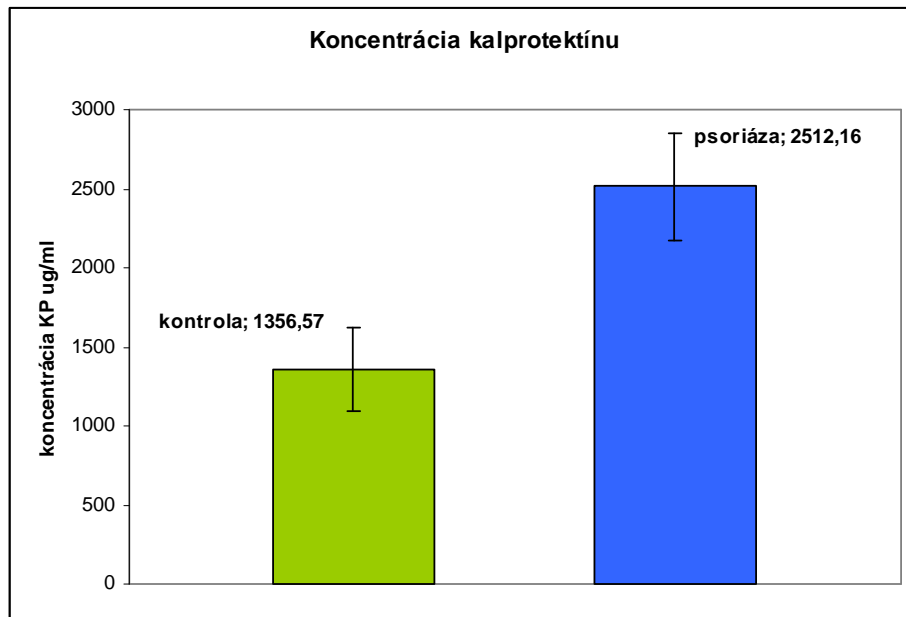
Ducárová_Dominika^{1,*}, Muchová_Jana²

1. Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
2. Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie, Sasinkova 2, 813 71 Bratislava
* ducarova.dominika@gmail.com

Koža je hlavným terčom oxidačného poškodenia najmä kvôli ROS pochádzajúcich z prostredia, ale aj z metabolizmu samotnej kože. Hoci endogénne antioxidanty zoslabujú škodlivý účinok ROS, zvýšená alebo dlhotrvajúca prítomnosť voľných radikálov môže premôcť obranné mechanizmy. Vzniká oxidačný stres, ktorý prispieva k rozvoju rôznych kožných chorôb, zahŕňajúc aj ochorenie psoriáza. Psoriáza je chronické zápalové ochorenie kože s neznámou etiológiou, ktorá súvisí s abnormálnym metabolizmom lipidov [Đuračková, 2010; Mallbris a kol, 2006; Péc a kol, 2006] a oxidačným stresom [Zhou a kol, 2009].

V našej štúdii sme sa zamerali na stanovenie:

1. markerov oxidačného stresu – lipoperoxidov, karbonylov proteínov, 8-izoprostánov, nitrotyrozínu a produktov pokročilej oxidácie proteínov. U pacientov so psoriázou sme zaznamenali zvýšenú koncentráciu lipoperoxidov ($P < 0,05$), 8-izoprostánov ($P < 0,05$). Koncentrácia produktov pokročilej oxidácie proteínov (AOPP) bola u pacientov zvýšená, ale Studentov t test nepotvrdil signifikanciu ($P > 0,05$). Namerali sme významne znížené koncentrácie karbonylov proteínov ($P < 0,05$) aj nitrotyrozínu ($P < 0,05$) u pacientov so psoriázou v porovnaní s kontrolnou skupinou.
2. aktivity antioxidačných enzýmov – superoxidodismutáza SOD, glutatiónpoxidáza GPx a kataláza CAT. Aktivity enzýmov GPx a CAT nevykazovali rozdiely ($P > 0,05$) u pacientov so psoriázou v porovnaní s kontrolnou skupinou. Avšak aktivita SOD bola signifikantne zvýšená u pacientov so psoriázou ($P < 0,05$).
3. koncentrácie nového zápalového markeru – kalprotektínu KP. Zaznamenali sme významne zvýšenú koncentráciu KP ($P < 0,05$) u pacientov so psoriázou v porovnaní s kontrolnou skupinou (graf č.1).
4. parametrov základnej biochémie, niektorých iónov a krvného obrazu. Pacienti s diagnostikovaným ochorením psoriáza mali významne zvýšené hladiny erytrocytov ($P < 0,05$), hemoglobínu ($P < 0,05$), hematokritu ($P < 0,05$), absolútneho počtu neutrofilov ($P < 0,05$), leukocytov ($P < 0,05$), monocytov ($P < 0,05$) aspartátaminotransferázy AST ($P < 0,05$), alkalickéj fosfatázy ALP ($P < 0,05$), γ -glutamyltransferázy GMT ($P < 0,05$), C-reaktívneho proteínu CRP ($P < 0,05$), iónov draslíka ($P < 0,05$). Naopak významne znížené hladiny oproti kontrolnej skupine mali psoriatickí pacienti v týchto parametroch: celkový bilirubín ($P < 0,05$) a ióny vápnika ($P < 0,05$).



graf č.1: Porovnanie koncentrácie kalprotektínu u pacientov so psoriázou a u kontrolnej skupiny v µg/ml krvej plazmy.

Prítomnosť oxidačného stresu u ochorenia psoriáza potvrdila zvýšená koncentrácia lipoperoxidov. Tento jav uvádzajú aj iné štúdie venujúce sa psoriáze (Górnicki a Gutsze, 2001; Kokcam a Naziroglu, 1999; Kural a kol, 2003; Rocha-Pereira, 2004). Keďže ide o zápalové ochorenie, kde je zvýšená infiltrácia neutrofilov a teda aj zvýšená produkcia ROS (reaktívnych metabolitov kyslíka), pozorujeme zvýšenú prítomnosť oxidačného stresu. Oxidačný stres podľa našej štúdie však nepôsobí na všetky biomolekuly rovnako. Oxidačné poškodenie proteínov, kde sme ako markery použili AOPP nebolo významné. Signifikanciu sme však zaznamenali pri nitrotyrozíne a karbonyloch proteínov, ktoré boli štatisticky významne znížené u psoriatických pacientov v porovnaní s kontrolnou skupinou. Dokonca sme pozorovali tendenciu zníženého oxidačného poškodenia proteínov u pacientov so psoriázou. Z nameraného usudzujeme, že lipidy sú u týchto pacientov omnoho náchylnejšie na oxidačné poškodenie (signifikantne zvýšená koncentrácia 8-izoprostánov a lipoperoxidov u psoriatických pacientov, čo sú markery oxidačného poškodenia lipoproteínov).

Viacere štúdie sa rozchádzajú v hodnotách aktivít antioxidantných enzýmov. My sme stanovili významne zvýšenú aktivitu len u enzýmu SOD. Ten premieňa voľný radikál superoxid na menej reaktívny peroxid vodíka. Keďže enzýmy vychytávajúce peroxid vodíka (GPx a kataláza) neboli nijak významne zvýšené (dokonca mali ich aktivity tendenciu klesať), peroxid vodíka môže vstupovať do reakcií fentonovho typu a tvoriť tak vysoko reaktívny hydroxylový radikál. Tým môže byť spôsobená zvýšená lipoperoxidácia, pretože hydroxylový radikál je iniciátorom práve lipoperoxidácie.

Vyhodnocovali sme aj viacere korelácie medzi meranými parametrami. Zaznamenali sme negatívnu koreláciu medzi koncentráciou lipoperoxidov a aktivitou katalázy ($P=0,0026$; $\rho=-0,5484$). Z uvedenej korelácie vyplýva, že kataláza znižuje koncentráciu lipoperoxidov. Je to spôsobené pravdepodobne tým, že kataláza rozkladá peroxid vodíka, a ten nemôže vstupovať do reakcií fentonovho typu, pri ktorých vzniká hlavný iniciátor peroxidácie lipidov – hydroxylový radikál. Keďže u GPx sme podobnú koreláciu nezaznamenali predpokladáme, že práve kataláza zohráva významnú ochrannú úlohu pred lipoperoxidáciou u pacientov so psoriázou.

Psoriáza je zápalové ochorenie a preto sme stanovili aj zápalové markery CRP a kalprotektín nový marker zápalu. Kalprotektín sa považuje za jednoduchý, neinvazívny a vysoko citlivý marker

črevného zápalu. V poslednej dobe sa pozornosť zameriava aj na jeho stanovenie v plazme. Tam je jeho koncentrácia niekoľkonásobne nižšia než v stolici. Na stanovenie kalprotektínu v plazme sme použili komerčne dostupný set. Po optimalizácii riedenia nám vyšli signifikantne zvýšené hladiny kalprotektínu v skupine psoriatických pacientov oproti kontrolnej skupine. Predpokladali sme pozitívnu koreláciu medzi trvaním psoriázy a koncentráciou kalprotektínu, čo by mohlo pomôcť v monitorovaní vývinu ochorenia. Túto koreláciu sme nepotvrdili.

V parametroch základnej biochémie boli signifikantne zvýšené pečeneňové markery (celkový bilirubín, AST, ALP). Keďže psoriáza je systémové ochorenie, tvorba ROS ako dôsledok zápalu pravdepodobne vplýva aj na pečeň. Túto skutočnosť sme však bližšie neskúmali.

Naše výsledky podporujú hypotézu, že v patogenéze psoriázy zohráva úlohu aj oxidačný stres, ktorý je podmienený zvýšenou produkciou ROS a prítomnosťou zápalu.

Hoci psoriáza nepatrí medzi novoobjavené ochorenia, stále sa nepozná jej etiológia a v ostatných desaťročiach sa jej venoval snád' najintenzívnejší výskum v rámci kožných ochorení. Psoriáza postihuje približne 2 – 3 % populácie, výrazne ovplyvňuje kvalitu života pacienta a je závažným problémom nielen zdravotným, ale aj sociálnym. Je preto užitočné venovať skúmaniu tohto ochorenia náležitú pozornosť.

Použitá literatúra:

- 1) Zhou, Q. a kol. Oxidative stress in the pathogenesis of psoriasis. *Free Radical Biology & Medicine*, vol. 47, p. 891-905 (2009)
- 2) Mallbris, L. a kol. Psoriasis is associated with lipid abnormalities at the onset of skin disease. *Journal of the American Academy of Dermatology*. vol. 54(4), p. 614-621 (2006)
- 3) GORNICKI, A. a GUTSZE, A. Erythrocyte membrane fluidity changes in psoriasis: an EPR study. *Journal of Dermatological Science*. vol. 27, p. 27-30 (2001)
- 4) Kökçam, I. a NAZIROĞLU, M. Antioxidants and lipid peroxidation status in the blood of patients with psoriasis. *Clinica Chimica Acta*.vol. 289, p. 23-31 (1999)
- 5) KURAL, B. V. a kol. Evaluation of the atherogenic tendency of lipids and lipoprotein content and their relationships with oxidant-antioxidant system in patients with psoriasis. *Clinica Chimica Acta*. vol. 328, p. 71-82 (2003)
- 6) Péč, J. a kol. Chronická ložisková psoriáza – Komplexný pohľad na problematiku a biologická liečba. Dali – BB s.r.o. 182 s. ISBN 8089090214 (2004)
- 7) Ďuračková, Z. Current Insights into Oxidative Stress. *Physiological reseach*, 2010, vol. 59, p. 459-469. ISSN 0862-8408

Detekcia singletového kyslíka pri fotodynamickej akcii

Varchola Jaroslav¹

Katedra biofyziky, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika,

Jesenná 5, 040 10 Košice, Slovenská republika

jerome.warhol@gmail.com

Úvod

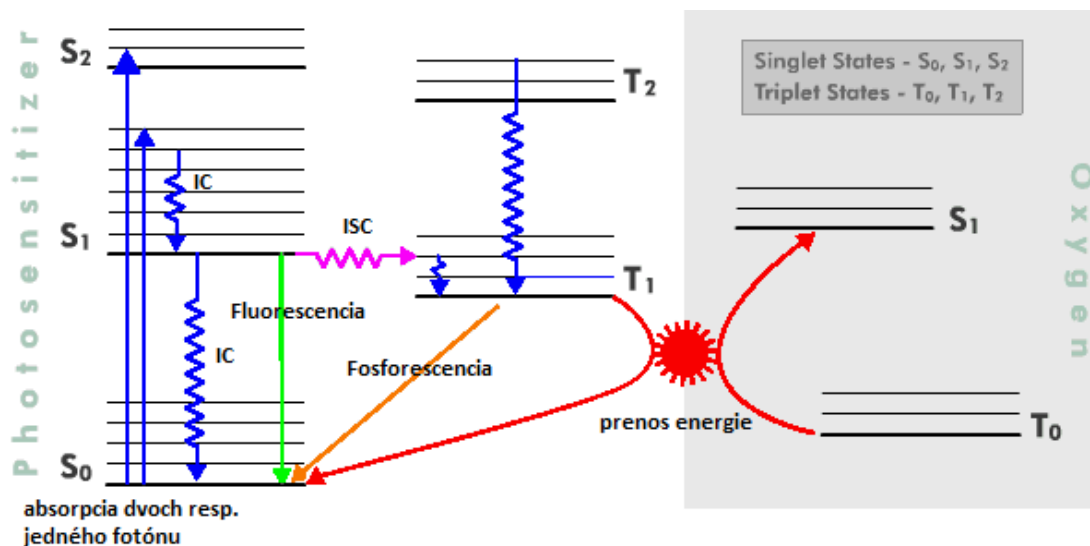
Jednou z moderných metód liečby nádorových ochorení, ktorej sa v súčasnosti venuje široký výskum, je fotodynamická terapia (PDT), ktorá v sebe spája kombináciu svetla a fotosenzitívnej látky (fotosenzibilizátora). Fyzikálno-chemický mechanizmus PDT zahŕňa aj tvorbu singletového kyslíka [1] generovaného prenosom energie z tripletového stavu fotosenzibilizátora (napr. hypericínu). V dôsledku svojej vysokej reaktivity, singletový kyslík, ktorý vzniká pri PDT spôsobuje deštrukciu okolitého nádorového tkaniva. V ideálnom prípade dochádza pri PDT k spusteniu apoptózy – programovanej bunkovej smrti.

Cieľom práce je postavenie aparatury na detekciu singletového kyslíka pri procese fotoexcitácie hypericínu pomocou merania fosforescencie singletového kyslíka pri vlnovej dĺžke 1270 nm. Aparatúra pozostáva z pulzného lasera (kombinácia Nd: YAG a OPO) a detekčného systému (fotonásobič). Podarilo sa nám zmerať časovú závislosť a spektrum fosforescencie singletového kyslíka.

Teória

Po vstreknutí fotosenzibilizátora do tela a jeho následnom ožiarení svetlom správnej vlnovej dĺžky sa môže fotosenzibilizátor dostať zo základného singletového stavu do jedného z excitovaných stavov. Odtiaľ sa môže vnútornou konverziou (IC - internal conversion) alebo vyžiarením fotónu (fluorescenciou) opäť vrátiť do základného stavu s najnižšou energiou (obr. 1). Nejaké percento molekúl fotosenzibilizátora však absolvuje medzisystémový prechod (ISC - intersystem crossing) a dostane sa do metastabilného tripletového stavu, ktorý je podstatne dlhšie žijúci stav ako excitovaný stav S_1 . Ak sa vyžiarením fotónu, s väčšou vlnovou dĺžkou ako fluorescenčný fotón, nevráti fotosenzibilizátor zo stavu T_1 do pôvodného stavu (jav fosforescencie), tak vďaka svojej dlhšej dobe života ako excitovaný singletový stav môže interagovať s molekulami v okolí. Pre PDT najdôležitejšou molekulou na reakciu

s fotosenzibilizátorem v stave T_1 je molekulový kyslík, ktorý sa v bunkovom prostredí vyskytuje vo veľkom množstve. Produktom tejto reakcie je vysoko reaktívny singletový kyslík (1O_2).



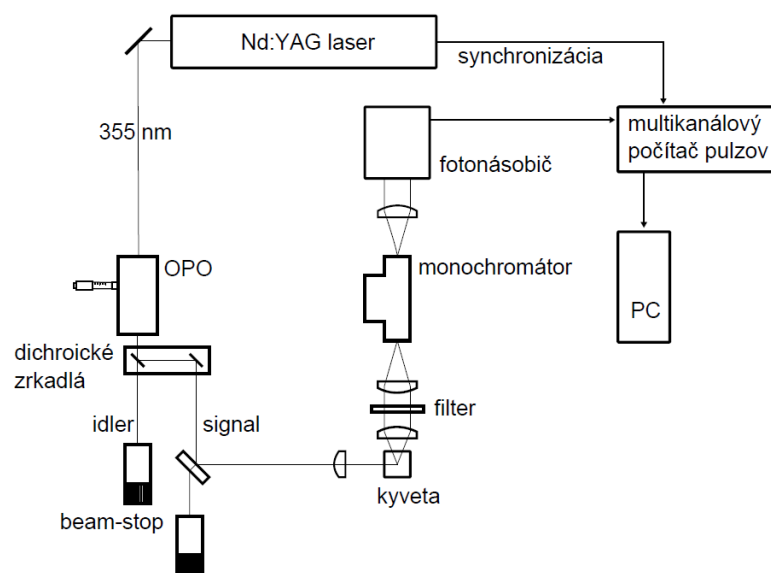
Obr. 1: Mechanizmus fotodynamickej akcie

Spustenie programovanej bunky smrti nádorovej bunky kvôli poškodeniu spôsobenému singletovým kyslíkom teda závisí od množstva 1O_2 vzniknutého počas fotodynamickej terapie, preto je pre zefektívnenie tejto liečebnej metódy veľmi užitočné nejakým spôsobom singletový kyslík detekovať a dokázať zmerať jeho množstvo v závislosti od prostredia alebo použitého fotosenzibilizátora.

Existuje viacero metód pre detekciu singletového kyslíka, medzi ktoré patrí aj sledovanie slabej fosforescencie prechodu do základného stavu kyslíka $O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-)$, ktorej maximum sa nachádza v blízkej infračervenej oblasti pri vlnovej dĺžke približne 1270 nm (Ogilby, 2010). Jednou z motivácií tejto práce bolo práve zmerať množstvo tejto fosforescencie po vybudení hypericínu pulzným laserom v roztoku etanolu a acetónu. Na svete existuje len niekoľko aparátúr, ktoré sú určené na zachytenie tejto fosforescencie. Dva hlavné dôvody, prečo to tak je, sú nízka kvantová účinnosť fosforescencie singletového kyslíka a tiež to, že optické detektory v blízkej infračervenej oblasti nie sú veľmi efektívne.

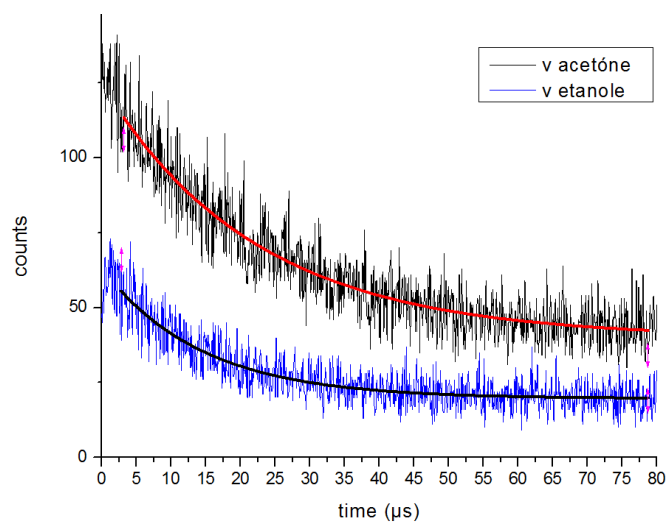
Výsledky

Schému aparatury postavenej v rámci tejto práce je vidieť na obr. 2. Na excitáciu nami vybraného fotosenzibilizátora – hypericínu, ktorého využitím v PDT sa zaoberá výskum na našej katedre, sme použili tretiu harmonickú frekvenciu pulzného lasera Nd:YAG (výstupný lúč – 355 nm) v kombinácii s optickým parametrickým oscilátorom (OPO), ktorý nám umožnil naladiť excitačnú vlnovú dĺžku na nami požadovaných 592 nm (absorpčný pík hypericínu v etanole). Fosforescenčný signál sme od nežiaducich signálov filtrovali použitím monochromátora a zachytávali ho na fotonásobiči, špeciálne určenom na prácu v blízkej infračervenej oblasti. Zosynchronizovanie laserového pulzu s multikanálovým počítačom pulzov nám umožnilo urobiť časovo rozlíšené meranie fosforescencie $^1\text{O}_2$.

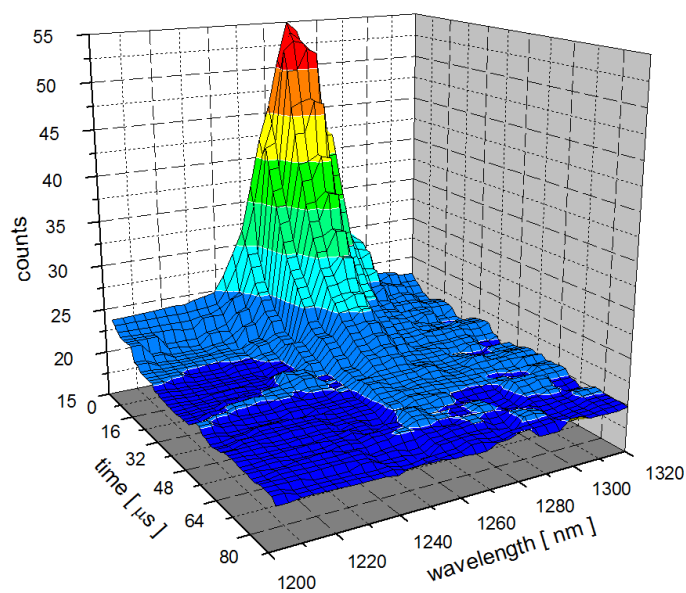


Obr. 2: Schéma našej aparatury

Výsledkom našich meraní je záznam časového priebehu a spektra fosforescencie singletového kyslíka po excitačnom pulze. Na obr. 3. je vidieť dohasínanie fosforescencie pri 1270 nm v roztokoch hypericínu v acetóne a etanole. Charakteristický čas dohasínania fosforescencie singletového kyslíka sme namerali 22 μs v acetóne a 14 μs v etanole. Obr. 4. ukazuje výsledky meraní fosforescencie pri rôznej vlnovej dĺžke detekcie. Singletový kyslík fosforeskuje podľa našich meraní najviac pri vlnovej dĺžke 1270 nm. Uvedené výsledky dokazujú funkčnosť našej aparatury a umožňujú jej ďalšie využitie pri objasňovaní faktorov ovplyvňujúcich efektívnosť produkcie singletového kyslíka a tým aj účinnosť fotodynamickej terapie.



Obr. 3: Fosforescencia singletového kyslíka po excitovaní 50 μM hypericínu v roztokoch etanolu a acetónu pri vlnovej dĺžke 1270 nm. Červená a čierna zvýraznená krivka predstavujú mono-exponenciálny fit



Obr.4: 3D spektrum fosforescencie singletového kyslíka vzniknutého po excitovaní hypericínu (koncentrácia 50 μM) v roztoku etanolu

Literatúra

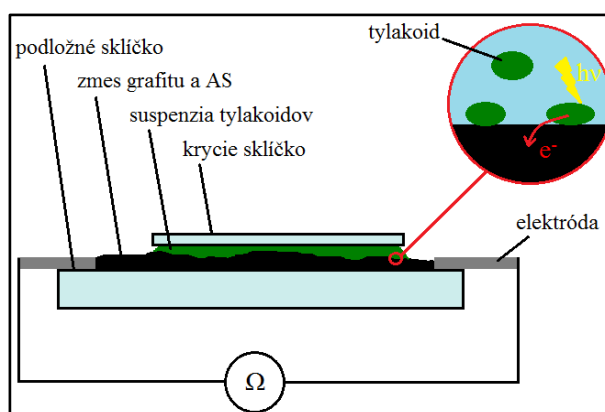
1) Ogilby, Peter R. Singlet Oxygen: there is indeed something new under the sun. *Chemical Society Reviews*, 2010, **39**, 3181-3209

CHLORISTOR – BIOFOTOREOSTAT NA BÁZE FOTOSYNTETICKÝCH ŠTRUKTÚR TYLAKOIDOV A GRAFITU

Vanta Radovan

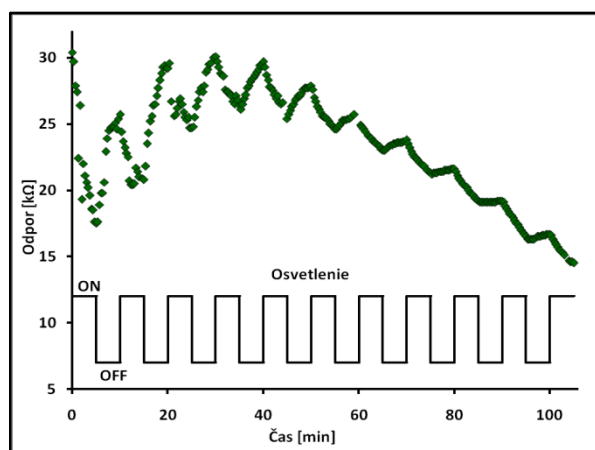
*Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
rado1ta@gmail.com*

Jedným z rýchlo sa rozvíjajúcich smerov súčasného vedeckého výskumu v oblasti biotechnológií je aj bioelektronika, kde vzniká snaha o zabudovanie biologických štruktúr, väčšinou biomakromolekúl, do elektronických systémov. V posledných rokoch sa však objavuje tendencia integrovať do týchto systémov štruktúrne čoraz zložitejšie biologické komponenty. Tento trend osobitne nadobúda opodstatnenie pri integrácii fotosyntetických štruktúr rastlín za účelom výroby fotovoltických článkov a senzorov svetla.



Obr.1: Schéma chloristoru.

V práci bol navrhnutý jednoduchý bioelektronický prvok na báze fotosyntetických kompartmentov tylakoidov a grafitu, ktorý reaguje na osvetlenie zmenou odporu. Kľúčovými látkami pri jeho výrobe sú pritom bežne dostupné suroviny – špenát a grafit, čím sa odlišuje od predchádzajúcich prác podobného charakteru¹⁾. Odpor takéhoto systému je funkciou premennej, ktorú možno ovplyvňovať (osvetlenie), teda systém spĺňa funkciu reostatu. Keďže je zložený z biologických komponentov a reaguje na svetlo, ide o biofotoreostat, ktorý dostal pracovný názov chloristor.



Obr.2: Graf časového priebehu odporu chloristoru.

o obr.1. Tylakoidy v chloristore pri osvetlení produkujú elektróny²⁾, ktoré sa dostávajú do vodivej grafitovej vrstvy a tým znižujú jej odpor. Tento jav bol pozorovaný v experimente,

kde sa meral odpor systému pri striedavom osvetľovaní a zatemňovaní počas 5-minútových intervalov (obr.2). Systém reagoval na osvetlenie klesaním odporu, pričom charakteristický čas tohto poklesu boli rádovo minúty. Po ustálení systému (asi 50 minút od výroby a začiatku merania) bola rýchlosť zmeny odporu pri osvetlení približne konštantná pričom stredná hodnota bola $2,34 \pm 0,273 \text{ k}\Omega / 5 \text{ min.}$. Relatívna štandardná odchýlka rýchlosti zmeny odporu pri osvetlení po ustálení však stále predstavovala 10,1%, teda chloristor v tejto forme nie je použiteľný na meranie osvetlenia (prípadne zmenu odporu osvetlením), keďže by preukazoval príliš veľkú nepresnosť. Jasne však vidno, že jeho odpor súvisí s osvetlením a možno predpokladať, že pri kvalitnejšom zostrojení chloristora by sa presnosť mohla vylepšiť.

Tylakoidy sú pre fungovanie chloristoru nevyhnutné avšak podložná vodivá vrstva môže byť vytvorená z rôznych látok, čo sa ukázalo v ďalších experimentoch. Po nahradení alginátu sodného polyvinylalkoholom chloristor stále reagoval na osvetlenie zmenou odporu, teda samotný polymér použitý v suspenzii čiastočiek grafitu zrejme nemá vplyv na funkčnosť systému a slúži len na stmelenie vrstvy. V ďalších dvoch experimentoch bola suspenzia grafitu nahradená vrstvami s veľmi nízkym odporom (vrstva hliníka s odporom $R_{Al}=0,13 \Omega$ a vrstva čistej tuhy $R_C = 3,46 \Omega$). Takto pripravené systémy na osvetlenie nereagovali zmenou odporu. Tieto experimenty teda poukazujú, že kľúčovou vlastnosťou vodivej vrstvy pre jej využitie v chloristore je veľkosť odporu tejto vrstvy, pričom vhodná hodnota by mohla byť rádovo 10 k Ω .

Otázkou zostáva ako zabezpečiť dlhšiu životnosť chloristoru. Problémom je rýchly pokles aktivity tylakoidov, nadmerná produkcia iónov H^+ a odparovanie vody zo systému.

Referencie:

- 1) N.M.Bedford, G.D.Winget, S.Punnamaraju, A.J.Steckl. Immobilization of Stable Thylakoid Vesicles in Conductive Nanofibers by Electrospinning. *Biomacromolecules*, 12, 778-784, (2011).
- 2) M.Kaplanová, J.Nauš, K.Vacek. Fyzikální základy fotosyntézy, str. 44 a str. 46. *Státní pedagogické nakladatelství, Praha*, (1987).

Endotelová dysfunkcia v experimentálnej hypertenzii

Veronika Ilovská^{1,*}, Angelika Púzserová², Iveta Waczulíková¹

1. *Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava*
2. *Ústav normálnej a patologickej fyziológie Slovenskej akadémie vied,
Sienkiewiczova 1, 813 71, Bratislava*

* veronika.ilovska@gmail.com

Práca sa zaoberá štúdiom cievneho endotelu - jeho funkcie vo fyziologickom stave a dysfunkcie pri artériovej hypertenzii. Hypertenzia patrí do skupiny kardiovaskulárnych ochorení, ktorým patria v dnešnej dobe prvé miesta v rebríčku príčin úmrtnosti obyvateľstva. Etiopatogenetická klasifikácia rozlišuje primárnu (esenciálnu) a sekundárnu hypertenziu, pri ktorej je zvýšenie tlaku krvi dôsledkom iného patologického stavu. V našej práci sa zaoberáme primárnou hypertenziou, ktorá sa určuje vylúčením sekundárnych príčin [1].

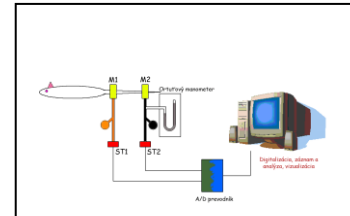
Endotel je bunková monovrstva, ktorá predstavuje dynamický orgán vystielajúci luminálny povrch každej cievy. Považuje sa za najväčší endokrinný orgán tela, keďže tvorbou konstriktorických (EDCFs) a relaxačných faktorov zabezpečuje udržiavanie cievneho tonusu [2]. Endotelové bunky plnia centrálnu kontrolnú funkciu lokalizáciou medzi cirkulujúcou krvou a tkanivom, ktoré tvorí bariéru cievnej steny [3]. Fyziologickú úlohu EDCFs je ťažké presne definovať. Napriek tomu pri patologických podmienkach zohrávajú veľmi dôležitú úlohu – ich signálna funkcia je udržiavaná, ba až posilňovaná [4]. Najdôležitejším, resp. najviac študovaným vazodilatátorom, ktorý je uvoľňovaný endotelom, je oxid dusnatý (NO). Je to jednoduchý plyn, vznikajúci vo voľnoradikálovej forme pôsobením enzýmu endotelovej NO-syntázy, ako signálna molekula pre produkciu špecifickej odpovede [5].

Nerovnováha medzi konstriktorne a relaxačne pôsobiacimi faktormi sa označuje ako endotelová dysfunkcia, ktorá je rizikovým faktorom pre väčšinu kardiovaskulárnych ochorení [6]. Predpokladá sa, že hlavnou príčinou endotelovej dysfunkcie u ľudí je biologický nedostatok NO, ktorý je najčastejšie spôsobený porušením rovnováhy medzi oxidačnými a antioxidačnými procesmi v cievnej stene – oxidačným stresom [5]. Stanovenie endotelovej dysfunkcie má významnú prognostickú hodnotu, preto sa jej štúdiu venuje v základnom aj klinickom výskume veľká pozornosť [7].

Pochopenie úlohy vazoaktívnych endotelových faktorov v normotenzii a spontánnej hypertenzii u experimentálnych zvierat nám otvára možnosť porozumieť odlišnostiam, ktoré sprevádzajú reguláciu krvného tlaku v podmienkach esenciálnej hypertenzie. Cieľom našej práce bolo sledovať relaxačné a konstriktorné odpovede, s dôrazom na funkciu endotelu a úlohu NO v arteria femoralis (FA) u mladých (7-týždňových) a dospelých (22-týždňových) spontánne hypertenzných potkanov (SHR) v porovnaní s normotenznými Wistar-Kyoto (WKY) potkanmi. Spontánne hypertenzné potkany sú najvhodnejším laboratórnym modelom s hypertenziou, ktorá sa v mnohých aspektoch podobá na primárnu hypertenziu u ľudí. Tento kmeň bol vyšľachtený v r.1963 v Japonsku inbredným krížením potkanov kmeňa Wistar-Kyoto s najvyšším krvným tlakom. V 4.-6. týždni im začne spontánne stúpať krvný tlak a

ustáli sa na hodnote systolického tlaku zhruba 180-200 mmHg [8]. Kmeň SHR sa využíva na hodnotenie vysokým krvným tlakom indukovaných zmien v cievnej reaktivite a genetických faktorov v hypertenzii [5].

Tlak krvi (TK) a pulzovú frekvenciu (PF) sme merali pletyzmograficky. Ide o neinvazívnu manžetovú metódu, kedy sú dve manžety navlečené čo najtesnejšie ku koreňu chvosta bdelých zvierat. Referenčná manžeta slúži na detekciu TK pomocou pulzového senzora (tenzometer) a táto je pomocou balónika napumpovaná na hodnotu 90 mmHg. Regulačná manžeta (oklúzna) je navlečená ku koreňu chvosta potkana a umožňuje regulovať prívod krvi do chvosta. Mechanický signál z oboch manžiet sa pomocou prevodníka konvertuje na elektrický signál a ten sa hodnotí pomocou počítača.



Funkciu ciev sme hodnotili *in vitro* na prstencoch FA s dĺžkou asi 1,5 mm, za izometrických podmienok pomocou Mulvaného myografu. Testovanie cievnej reaktivity je najpoužívanejšia metóda klinického a experimentálneho posudzovania endotelovej funkcie. Cieľom týchto testov je aktivovať alebo blokovať funkciu endotelových buniek a následne zmerať zmeny cievneho tonusu vo vyizolovaných úsekoch cievy [9]. Počas experimentu sme do vaničky myografu s fyziologickým roztokom, kde bola na čeľuste tenzometra a mikrometra pomocou dvoch 40 μm drôtikov umiestnená FA, pridávali rôzne farmakologické látky a pozorovali sme zodpovedajúce kontrakčné alebo relaxačné odpovede. Tieto odpovede sme zaznamenávali a potom štatisticky spracovali metódou analýzy variancie.

Vnútorňý diameter (VD) ciev bol určený pomocou počítača pri procese normalizácie, kedy sme cievu stupňovitým napínaním pomocou mikrometra natiahli na tlak 90% zo 100 mmHg (13,3 kPa). Dosiahli sme tak optimálny vnútorňý diameter, ktorý udáva maximálne odpovede [10]. Hmotnosť tela (HT) sme sledovali niekoľko týždňov pred experimentom. Uvádzame finálne hodnoty. Pri hodnotách TK a PF sme pozorovali signifikantný nárast u SHR v oboch vekových skupinách v porovnaní s WKY potkanmi. V rámci fenotypu sme u WKY nepozorovali žiadne zmeny. Zistili sme signifikantný nárast TK u dospelých SHR v porovnaní s mladými SHR potkanmi. V práci [11] pozorovali u SHR podobné zvýšenie krvného tlaku vplyvom veku. Taktiež sme zistili signifikantné zníženie HT a VD v oboch SHR skupinách v porovnaní s WKY potkanmi. Podobné zníženie hmotnosti počas celého ontogenetického vývinu u SHR uvádzajú aj iní autori [12]. Ďalej sme pozorovali vekom podmienený nárast HT aj VD u oboch fenotypov, čo považujeme za fyziologický prejav.

Noradrenalín (NA) je látka pôsobiaca na viaceré typy adrenergických receptorov. Vazokonstrikciu sprostredkujú α_1 -receptory na hladkosvalových bunkách a β_2 -receptory sprostredkujú vazodilatáciu. Na izolovanej FA je najvýraznejší účinok na α_1 -receptory, nakoľko je cieva na začiatku podávania NA celkom relaxovaná a β_2 -receptormi sprostredkovaná vazorelaxácia sa nemôže prejaviť. Podávanie NA do vaničky myografu vyvolalo u väčšiny artérií dvojfázovú kontrakciu. Najskôr sme pozorovali fázikú a potom tonickú kontrakciu. Podobný charakter vazokonstrikčnej odpovede na NA v FA zistili aj Asano et al. [13]. U WKY aj SHR sa vekom zvyšovala fáziká aj tonická kontrakčná odpoveď na NA. Hypertenzia u mladých potkanov nevyvolala zmenu vo fázikovej odpovedi. Tonická odpoveď bola signifikantne zvýšená. Hypertenzia u dospelých vyvolala zvýšenú fázikú aj tonickú kontrakčnú odpoveď. Z vekom podmieneného nárastu oboch kontrakcií pri

oboch fenotypoch môžeme usúdiť, že nejde len o výsledok remodelácie hladkosvalových buniek, ale pravdepodobne ide aj o zmenu receptorovej signalizácie. Na základe uvedených výsledkov predpokladáme zvýšený počet α_1 -receptorov alebo ich zvýšenú citlivosť a/alebo znížený počet β_2 -receptorov alebo ich zníženú citlivosť s narastajúcim vekom a hypertenziou, na čo poukázala práca [13].

Veľkosť relaxácie sme vyjadrili v absolútnych jednotkách (mN/mm), čím sme hodnotili relaxáciu nezávisle od veľkosti prekontrakcie [14]. V klinických aj experimentálnych štúdiách sa pre hodnotenie endotelovej funkcie najčastejšie používa acetylcholínový test. Acetylcholín (ACh) po naviazaní na muskarínové receptory na endotelových bunkách vyvoláva produkciu viacerých relaxačných faktorov (NO, prostacyklín, EDHF), ktoré potom vyvolávajú tzv. vazorelaxáciu závislú od endotelu. Prvou acetylcholínovou krivkou sme pozorovali celkovú relaxačnú odpoveď. Vplyvom veku sa celková relaxačná odpoveď nezmenila ani v jednom fenotype. Naopak, u SHR boli celkové relaxačné odpovede signifikantne znížené v oboch vekových skupinách v porovnaní s WKY potkanmi. Po stabilizácii cievy sme pridali do vaničky kompetitívny inhibítor NO-syntázy N^G-nitro-L-arginín metylester (L-NAME), čím sme vyblokovali produkciu NO. Urobili sme ďalšiu acetylcholínovú krivku a pozorovali sme relaxácie nezávislé od NO. Relaxačné odpovede sme hodnotili aj ako plochy pod krivkou a z nich sme jasne mohli porovnať zložky relaxácií, ktoré sú závislé a nezávislé od NO. U dospelých WKY (aj SHR) sme pozorovali signifikantné zníženie NO-závislej a signifikantné zvýšenie NO-nezávislej zložky relaxácie v porovnaní s mladými WKY (SHR). Vekom sa teda znižuje vplyv NO na vazorelaxáciu a túto úlohu preberajú iné vazorelaxačné faktory. Základné hypotézy opisujú, že tento fakt môže byť založený na znížení NO produkcie alebo na zvýšení jeho deštrukcie voľnými kyslíkovými radikálmi v procese starnutia. Zníženie bazálneho uvoľňovania NO vekom potvrdzuje aj Marín [15]. U mladých SHR bola NO-závislá zložka relaxácie nezmenená a signifikantne znížená bola NO-nezávislá zložka relaxácie, ktorá spôsobila pokles celkovej vazorelaxácie v porovnaní s mladými WKY. U dospelých SHR sme pozorovali rovnakú tendenciu voči dospelým WKY. Vplyvom hypertenzie je teda v rovnakej vekovej skupine NO dostupný v nezmenenej miere, znížená je prítomnosť ostatných relaxačných faktorov. Na biodostupnosť NO má teda väčší vplyv proces dospievania ako hypertenzia.

Od endotelu nezávislé relaxácie sme sledovali pomocou nitroprusidu sodného (SNP), ktorý je exogénnym donorom NO. Vazorelaxácia po reakcii s ním nie je závislá od uvoľňovania NO z endotelu a umožňuje ohodnotiť citlivosť hladkej svaloviny k NO. Vazorelaxácie indukované SNP nevykazovali signifikantné zmeny v žiadnej experimentálnej skupine.

Predpokladáme, že výsledky práce prispievajú k spoznávaniu patofyziologických mechanizmov v esenciálnej hypertenzii a úlohy NO v týchto procesoch. Výsledky tiež môžu prispieť k poznaniu tých miest v regulácii krvného tlaku a signálnej transdukcie v kardiovaskulárnom systéme, ktoré by mohli predstavovať cieľové miesta v prevencii hypertenzie u ľudí už v raných fázach hypertenzie.

Referencie:

- 1) M.Sninčák, Artériová hypertenzia: Súčasné klinické trendy. Košice, s.9-48 (2005).

- 2) I.Hulín a I.Hulín jr., Pľúcna cirkulácia, cievy endotel, hypotenzia a šok. Bratislava, s. 61-77 (1998).
- 3) D.G.S.Thilo-Körner and R.I.Freshney, The Endothelial Cell – A Pluripotent Control Cell of the Vessel Wall. KARGER, Basel (1983).
- 4) G.M.Rubanyi and P.M.Vanhoutte, Endothelium-Derived Contracting Factors. KARGER, Basel (1990).
- 5) I.Hulín a kol., Patofyziológia. Bratislava (2009).
- 6) J.Deanfield et al., Endothelial function and dysfunction. Part I: Methodological issues for assessment in the different vascular beds: a statement by the Working Group on Endothelin and Endothelial Factors of the European Society of Hypertension. In Journal of Hypertension. vol.23, no.1 , p.7-17 (2005).
- 7) D.Škultétyová a kol., Prognostický význam hodnotenia endotelovej dysfunkcie. In Cardiology. vol.13, no.4, p.216-219 2004.
- 8) Y.Yamori and K.Okamoto, Spontaneous hypertension in rats versus essential hypertension in man. In Singapore Medical Journal. vol.14, no.3, p.393-394 (1973).
- 9) A.Virdis and S.Taddei, How to evaluate microvascular organ damage in hypertension: assessment of endothelial function. In High blood pressure & cardiovascular prevention. vol.18, no.4, p.163-7 (2011).
- 10) A.Púzserová a kol., Stanovenie cievnej reaktivity pomocou drôťikového myografu. In Československá fyziológia. vol.59, no.1, p.4-7 (2010).
- 11) H.Wuorela et al., Arterial smooth muscle responses in adult and moderately aged spontaneously hypertensive rats. In Pharmacology & toxicology. vol.74, no.3, p.167-173 (1994).
- 12) M.Cebová a F.Kristek, Zmeny v geometrii cievnej steny artérie u spontánne hypertenzných potkanov počas ontogenetického vývinu. In Mechanizmy regulácie krvného tlaku a ich poruchy. Bratislava, s.205-218 (2006).
- 13) M.Asano and K.Aoki and T.Matsuda, Reduced beta adrenoceptor interactions of norepinephrine enhance contraction in the femoral artery from spontaneously hypertensive rats. In The Journal of pharmacology and experimental therapeutics. vol.223, no.1, p.207-214 (1982).
- 14) A.Púzserová and I.Bernátová, Chronic social stress increases nitric oxide-dependent vasorelaxation in normotensive rats. In Interdisciplinary Toxicology. vol.3, no.4, p.109-117 (2010).
- 15) J.Marín, Age-related changes in vascular responses: a review. In Mechanisms of Ageing and Development. vol.79, no.2-3, p.71-114 (1995).

Raman microspectroscopic study of thermal melting of nucleic acids in microfluidic devices with spectroscopic determination of local temperature from water stretching vibrations

Peksa Vlastimil^{1,*}, Mojzeš Peter¹

1. Charles University in Prague, Faculty of Mathematics and Physics, Institute of Physics, Ke Karlovu 5, CZ-12116 Prague 2, Czech Republic

* peksa.vlastimil@centrum.cz

Raman spectroscopy was proven to be powerful method for investigation of chemical composition, interactions, structural changes and conformational transitions of diverse biomolecules. As Raman scattering of water molecules do not obstruct significantly typical fingerprint region of vibrational spectra ($300 - 1800 \text{ cm}^{-1}$), the biomolecules can be studied in their natural environment, i.e. in aqueous solutions. In the past decades, Raman spectroscopy was widely used as an effective probe of physico-chemical, structural and dynamical properties of native, synthetic and chemically modified nucleotides and nucleic acids, e.g. for investigation of their base composition and base sequences, structural polymorphism, interactions with various ligands and determination of thermodynamic parameters governing their structural stability [1]. Specific Raman methodologies have been developed, exploiting advantages of non-resonance and resonance excitations, polarization effects, signal enhancement induced by metal nanostructures, time-resolved measurements, isotopic substitutions and thermally-induced phenomena. Recently, microfluidic devices in combination with Raman microspectroscopy have been introduced as a promising methodology enabling further miniaturization and automation of Raman measurements for high throughput biomedical and pharmacological applications [2].

Thermal melting of nucleic acids represents one of the most common task in determination of their thermodynamic parameters [1]. The information from melting is often used in search for efficient chemical modifications of nucleic acid structure suitable for development of new therapeutic antisense oligonucleotides [3]. Advantages of the Raman approach over calorimetric and UV-absorption methods consist in possibilities to distinguish local and global melting effects and to evaluate separately their contributions to the overall enthalpic and entropic changes [1]. Furthermore, base-sequence effects, premelting, melting and postmelting transformations and the role of specific groups in the process can be deduced from Raman spectra. Presently, temperature-dependent non-resonant Raman spectra of nucleic acids are routinely measured in a macroscopic arrangement requiring few microliters of the sample and DNA concentrations of dozens of mM (in nucleotides). Although total sample consumption is much smaller than for calorimetry, further reduction is desired for high throughput applications. Resonant UV excitation enables to decrease the sample concentration by 2 – 3 orders, however, because of the risk of photodecomposition, substantially greater volumes are needed, since the measurements have to be carried out on

circulating samples. Using a confocal Raman microscope and microfluidic devices, the sample volumes necessarily required for such measurements can be reduced, in principle, by several orders. Furthermore, tightly constrained excitation volume (only few μm^3), controlled flow of the sample in microchannels, highly localized heating and possibility to generate temperature gradients create space for even more sophisticated methodological approaches. In any case, the problems which have to be solved concern precise measurement of the temperature in the excitation volume [4] and detection limits of micro-Raman arrangement.

In the present work, a possibility to monitor thermal denaturation of DNA duplexes in microfluidic channels by means of non-resonant Raman microspectroscopy was studied and critically evaluated. Double-helical poly(rA)·poly(rU) was used as a model DNA system since its melting into single strands was shown to be interposed by a formation of triple-helical poly(rA)·poly(rU)·poly(rU) stabilized by the presence of Mg^{2+} ions [5-8]. Spectral detection of the triplex formation which differs from the duplex only by some subtle Raman features was used as a specific test of sensitivity and detection limits of the micro-Raman approach. For determination of actual temperature in the excitation volume, intensity and shape of water Raman bands at $\sim 3400 \text{ cm}^{-1}$ measured along with a fingerprint region of nucleic acids have been used (Fig. 1). As reported previously, OH-stretching vibrations of water molecules are temperature-dependent and can be used for semi-automated temperature determination by means of SVD-based methods [9]. Furthermore, the SVD procedures can be used for intensity normalization and correct subtraction of the solvent contribution [9]. To our best knowledge, our study represents the first attempt to apply the OH-stretching vibrations for temperature measurements in microfluidics.

As an ultimate reference, thermal melting of poly(rA)·poly(rU) and triplex formation was studied by means of a standard macroscopic arrangement (90° geometry, Jobin Yvon –Spex 270M, 532 nm / 200 mW excitation) and stationary temperature-controlled quartz cell of $5 \mu\text{l}$ volume routinely used in our laboratory for DNA-melting studies [3, 7, 8]. In the case of micro-Raman measurements, the spectra were measured in commercial microfluidic chips (Micronit Microfluidics) made from low-fluorescence glass and designed for optical detection. Aqueous solutions of 20 mM poly(rA)·poly(rU) in 50 mM Na^+ -cacodylic buffers (pH 7.1) with and without 10 mM Mg^{2+} were pumped through the microchannel (150×150

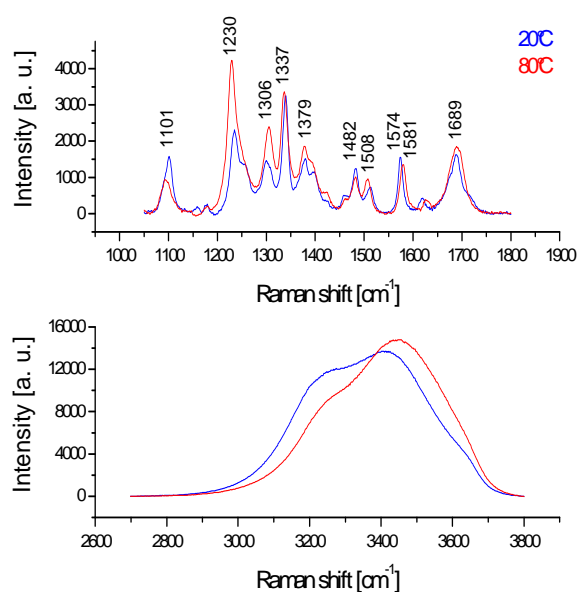


Fig. 1. Fingerprint region of the micro-Raman spectra of intact duplex (20°C) and melted random coils (80°C) of poly(rA)·poly(rU) in the absence of Mg^{2+} ions, and water OH-stretching bands used for temperature determination.

μm^2 profile) by means of picoliter syringe pump (kD Scientific) at a volume speed of 20 nl/min (linear speed of the flow $\sim 15 \mu\text{m/s}$). For a local heating, miniature SMD resistor was attached near the channel. By controlling the heating power, temperatures ranging from the room temperature (18°C) up to 90°C were adjusted comfortably. Raman spectra excited at 488 nm (power $\sim 7 \text{ mW}$) were recorded by using a commercial confocal Raman microscope LabRam HR800 (Horiba - Jobin Yvon) equipped with a dry $50\times$ (NA 0.55) objective with ultra-long working distance. Reference Raman spectra of the solvent at precisely known temperatures (that are needed for spectroscopic determination of the temperature in the channel) were measured in temperature-controlled macro-size quartz cell by using macroscopic mode of LabRam HR800.

Temperature series of Raman spectra acquired in macro- and micro-mode were normalized with respect to water OH-stretches and their temperatures were determined by the above described SVD methods [9] with an estimated inaccuracy of $\pm 2^\circ\text{C}$. Afterwards the spectra were solvent-corrected and their fingerprint regions analyzed again by SVD. Typical result of the factor analysis is shown in Fig. 2. Number of significant spectral components expressed by singular values W_j , characteristic spectral features of the corresponding subspectra S_j and thermal dependencies of the coefficients V_{ij} were compared for micro- and macro-modes. Rigorous analysis disclosed acceptable match between the results obtained by microscopic measurements in the microfluidic channels and the macroscopic measurements. In the case of poly(rA)·poly(rU) without Mg^{2+} ions, both approaches identified only two significant components corresponding to intact DNA duplex and equimolar mixture of disordered single-strands. On the other hand, for the samples containing Mg^{2+} , three spectral components were disclosed unanimously in the spectra acquired by both methods. Despite somewhat abstract character of the subspectra (Fig. 2), the second component S_2

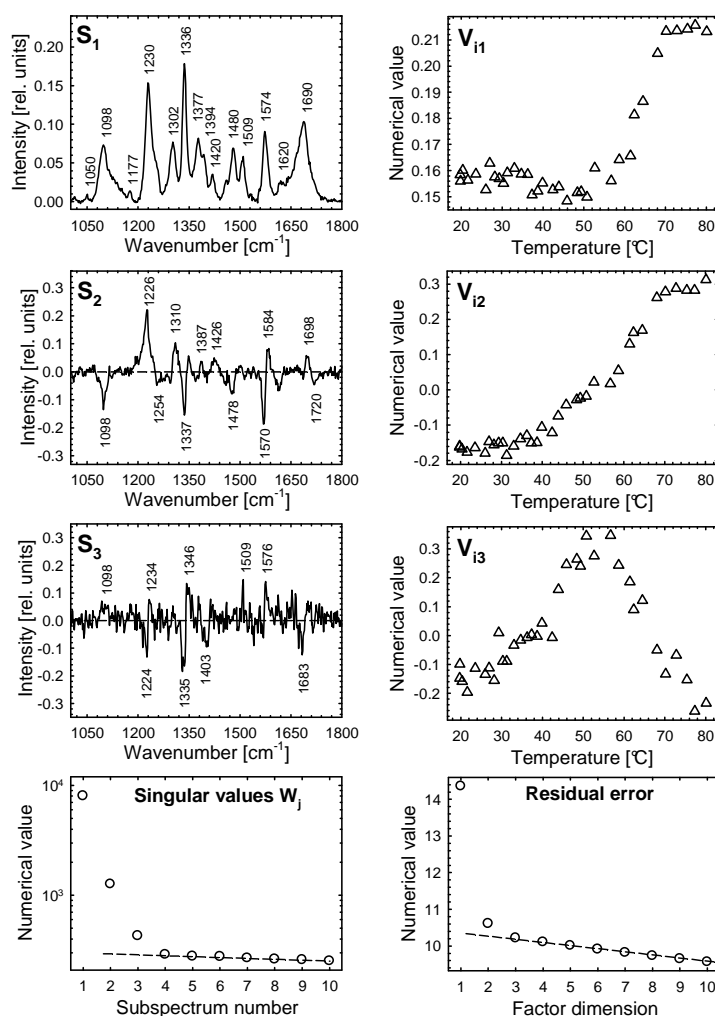


Fig. 2. Subspectra S_j and coefficients V_{ij} from factor analysis of solvent-corrected and normalized temperature-dependent Raman spectra of poly(rA)·poly(rU) in the presence of Mg^{2+} measured in a microfluidic chip. Formation of the triplex poly(rA)·poly(rU)·poly(rU) is evidenced by the presence of the third spectral component.

Despite somewhat abstract character of the subspectra (Fig. 2), the second component S_2

describes preferentially spectral differences accompanying duplex melting. Typical sigmoidal shape can be seen in temperature dependences of the coefficients V_{i1} and V_{i2} , and represents characteristic sign of cooperative transitions. The third orthogonal component S_3 describes slight spectral differences between duplexes and triplexes and was found to be consistent with results of previously reported Raman studies [7, 8].

Concluding, present work clearly demonstrated applicability of microfluidic devices and Raman microspectroscopy for melting studies of nucleic acids. It was proven that the microscopic approach yields the same results as macroscopic measurements. Possibility of reliable spectral determination of the sample temperature in microfluidic chips by means of water OH-stretching vibrations qualifies the method for broader use.

References:

- 1) J.M.Benevides, S.A.Overman, G.J.Thomas, *J. Raman Spectrosc.* **36**, 279-299 (2005)
- 2) P.J.Viskari, J.P.Landers, *Electrophoresis* **27**, 1797-1810 (2006)
- 3) D.Němeček, H.Vaisocherová, J.Štěpánek, P.-Y.Turpin, *Biopolymers* **79**, 1-8 (2005)
- 4) D.Kuvshinov, M.R.Bown, J.M.MacInnes, R.W.K.Allen, R.Ge, L.Aldous, C.Hardacre, N.Doy, M.I.Newton, G.McHale, *Microfluidics and Nanofluidics* **10**, 123-132 (2010)
- 5) B.I.Kankia, *Nucleic Acids Res.* **31**, 5101-5107 (2003)
- 6) V.K.Misra, D.E.Draper, *Biopolymers* **48**, 113-135 (1998)
- 7) K.Chmelová, J.Štěpánek, J.Hanuš, P.-Y.Turpin, *J. Mol.Struct.* **565**, 231-235 (2001)
- 8) J S.J.Espinoza Herrera, J.Štěpánek, *Spectroscopy* **24**, 445-448 (2010)
- 9) J.Palacký, P.Mojzeš, J.Bok, *J. Raman Spectrosc.* **42**, 1528-1539 (2011)

Skeletonizácia dýchacích ciest

Bc. Marek Franko

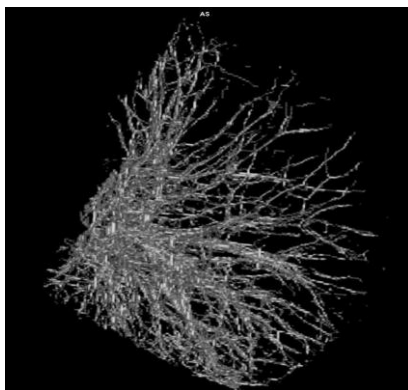
*ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J.Šafárika,
Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika*

Táto práca sa zaoberá návrhom a otestovaním netradičných algoritmov na spracovanie medicínskych dát. Prioritnou úlohou tejto práce je navrhnúť algoritmus na skeletonizáciu dýchacích ciest. Zdrojom dát pre túto prácu sú medicínske dáta získané pomocou CT alebo MRI modalít. Obraz získaný aplikovaním skeletonizačného algoritmu na vnútornú štruktúru ľudských pľúc sa dá neskôr implementovať ako fraktál resp. stromový graf a tak možno skúmať napríklad zmeny vnútornej štruktúry pľúc počas liečby pacienta resp. porovnávať štruktúru pľúc pred a po operačnom zákroku pomocou spomenutých matematických modelov.



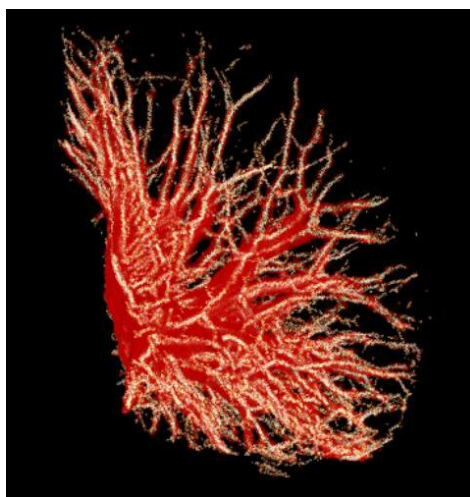
Obr.: Segmentovaná vnútorná štruktúra pľúc

Vnútorná štruktúra ľudských pľúc je relatívne zložitá a na pozorovanie skoro nedostupná, čo znamená že je výhodnejšie sa pozerať na dýchacie cesty pomocou obrazov produkovaných medicínskymi prístrojmi ako sú napr. CT alebo MRI. Cieľom tejto práce je navrhnúť algoritmus na spracovanie takýchto medicínskych dát a tým aproximovať vnútornú štruktúru pľúc na ich „čiarovú“ reprezentáciu pomocou techniky zvanej „skeletonizácia“. Aproximovaním vnútornej štruktúry pľúc získavame model, ktorý sa dá popísať matematickými metódami a tak lepšie pozorovať zmeny dýchacích ciest napríklad pri pacientoch s onkologickými ochoreniami.



Obr.: Skeleton dýchacích ciest

. Algoritmus použitý na skeletonizáciu v tejto práci sa nazýva Zhang-Suanov algoritmus ,ktorý je v tejto časti detailnejšie popísaný. Keďže sa algoritmus potreboval otestovať na anatomicky jednoduchších štruktúrach , najprv bol aplikovaný na segmentovanú ľudskú kosť. Následne som algoritmus aplikoval na pľúca čím sme získali skeletonizovanú vnútornú štruktúru pľúc.



Obr.: Prekrytie upravenej a neupravenej štruktúry

Literatúra:

- [1] BRADSKI, G., KAEHLER, A.: *Learning OpenCV*, O'Reilly Media, Sebastopol, California, 2008, ISBN: 978-0-596-51613-0.
- [2] J.R.Parker , *Algorithms for Image processing and computer vision* , New York
- [3] DICOM Homepage - súbor dokumentov popisujúcich DICOM štandard
- [4] Drebin, R.A., Carpenter, L., Hanrahan, P., "Volume Rendering", *Computer Graphics, SIGGRAPH88*. DOI citation link

PROUDĚNÍ A DIFÚZE UVNITŘ MĚSTSKÉ ZÁSTAVBY

Chaloupecká Hana^{1,*}, Jaňour Zbyněk²

1. *Katedra meteorologie a ochrany prostředí, MFF UK*

2. *Ústav termomechaniky AV ČR, v. v. i.*

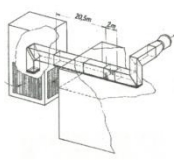
* hchaloupecka@seznam.cz

Jedinečnost měst spočívá i v tom, že se zde nalézá výstavba rozličných tvarů. Hlavním tématem této práce je porovnání šíření koncentrací v zástavbách odlišných typů. Je řešena tzv. inverzní úloha, tzn., že jsou určovány imise ve dvou pevných bodech od zdrojů umístěných v různých místech uvnitř městské zástavby pro různé konfigurace zástavby. Ke zkoumání šíření znečištění v těchto sídlištích jsme zvolili metodu fyzikálního modelování. Ta spočívá v simulaci okrajových podmínek zmenšeným modelem studované oblasti a jeho „ofukováním“ v aerodynamickém tunelu. Měření probíhalo na modelech v měřítku 1 : 300 v aerodynamickém tunelu Ústavu termomechaniky AV ČR, v. v. i. v Novém Kníně, jehož schéma je znázorněno na obr.1.

Pro modely jsme zvolili domy tvořené jednotlivými kvádry dvou odlišných délek rozestavených rovnoběžně, poté na dvory. Kratší domy měly tyto rozměry:

výška 10cm (~ 10 – ti patrový dům), délka 10 cm (~ 2 vchody u typické sídlištní zástavby v ČR), šířka 10 cm (odhadnutá průměrná šířka domů tvořících sídliště v ČR).

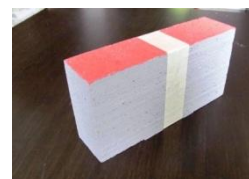
Delší domy jsme získali slepením vždy dvou kratších pomocí textilní lepicí pásky. Oba typy budov, které budeme nazývat dále zkráceně krátké a dlouhé domy, jsou vyobrazeny na obr. 2 a 3.



Obr. 1 – Schéma tunelu

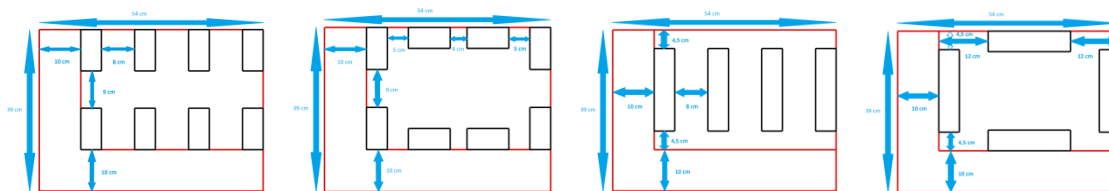


Obr. 2 – Krátký dům



Obr. 3 – Dlouhý dům

Pro každou z délek jsme dále zvolili dva typy tvarů zástavby – budovy rozmístěné rovnoběžně a do neuzavřených dvorů, v dalším textu označovány zkráceně rovnoběžné domy a dvory. Tím máme tedy celkově čtyři různá rozestavení budov, která v experimentálních uspořádáních tvoří základní elementy – bloky (viz obr. 4, 5, 6, 7), jež se v simulované sídlištní zástavbě opakují. Pro jednotlivá uspořádání zástavby si zavedeme následující zkratky: krátká K, dlouhá D, rovnoběžná r, dvůr d. Na nákresech základních elementů jsou vyznačeny rozměry rozestavení jednotlivých modelů domků v centimetrech. Ohraničení bloku je zobrazeno červeně. Stejnou barvou je naznačeno i rozhraní oblasti s myšlenou silnicí od zóny bez přítomnosti větších komunikací s domky. Tyto červeně naznačené myšlené oblasti nebudou na obrázcích zobrazujících výsledky měření koncentrací vyznačovány.



Obr. 4 – Kr

Obr. 5 – Kd

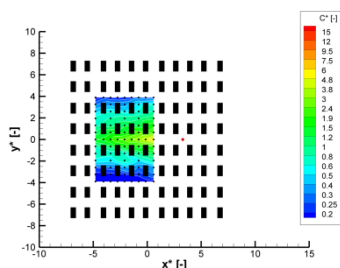
Obr. 6 – Dr

Obr. 7 - Dd

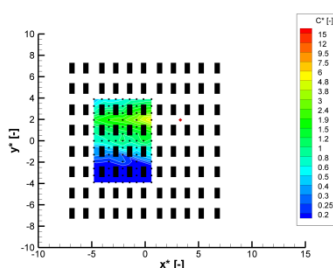
Dále jsme ověřili požadavky kladené na podobnost reálné mezní vrstvy a mezní vrstvy modelované v tunelu. Při samotném měření koncentrací v sídlištních zástavbách jsme nesledovali vlečku táhnoucí se od zdroje znečištění, ale studovali jsme úlohu k této inverzní. Měřili jsme koncentrace ve dvou pevných bodech (ve výšce 7mm nad dnem tunelu) vypouštěných postupně v různých bodech (ve výšce 2 mm nad dnem tunelu) námi definovaných sídlišť. K měření koncentrací jsme využili plamenový ionizační detektor FFID, ke zjištění velikosti rychlostí a turbulentních charakteristik, které jsme využili při ověřování podobnostního kritéria, pak optický laserový anemometr LDA.

V obrázcích zobrazujících výsledky měření užíváme bezrozměrné veličiny, které je možné zavést následovně: bezrozměrná souřadnice x : $x^* = \frac{x}{H}$, bezrozměrná souřadnice y : $y^* = \frac{y}{H}$, bezrozměrná koncentrace C : $C^* = \frac{CU_{ref}H^2}{Q}$. V těchto vztazích je symbolem H označena výška modelovaných budov, U_{ref} velikost rychlosti v x – ovém směru ve výšce $2H$ a Q vydatnost zdroje.

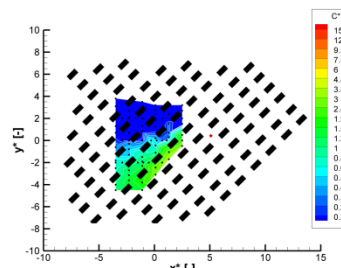
Výsledky měření jsou vyobrazeny 2D obrázky s osou x^* ve směru proudění v tunelu, y^* napříč tunelem. Směr proudění je vždy zleva doprava rovnoběžně s x^* . Budovy jsou znázorněny černými obdélníčky, černé tečky značí místa, ve kterých bylo vypouštěno znečištění, tj. umístění zdroje. Na každý obrázek připadá zhruba 80 těchto černých teček. V každém z obrázků je dále zobrazen vždy jeden červený kosočtverec představující místo, kde byla umístěna sonda FFIDu. Jí bylo měřeno znečištění vypouštěné postupně v místech černých teček vždy po dobu 2 minut. Za zkratkami rozestavení budov zavedenými výše je v následujících obrázcích uvedeno číslo označující úhel směru větru (0, 45, 90) vzhledem k prvnímu směru rozestavení, který označujeme jako nulový úhel náběhu proudění na simulovanou sídlištní zástavbu. Pro obrázek vztahující se k umístění sondy FFIDu na silnici si zavedeme označení a, při umístění ve středu zóny bez přítomnosti větších komunikací b.



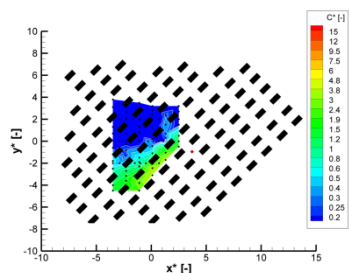
Obr. 8 – Kr0a



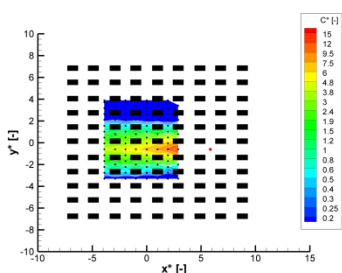
Obr. 9 – Kr0b



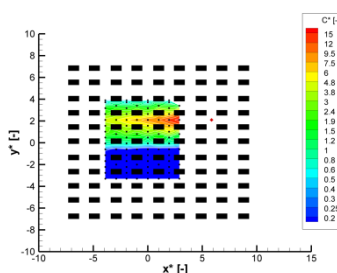
Obr. 10 – Kr45a



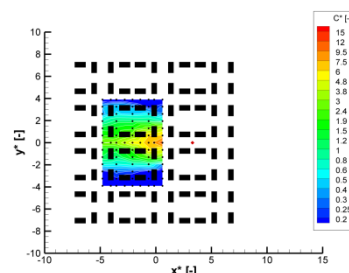
Obr. 11 – Kr45b



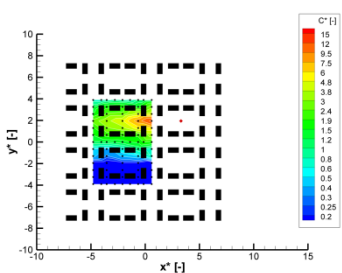
Obr. 12 – Kr90a



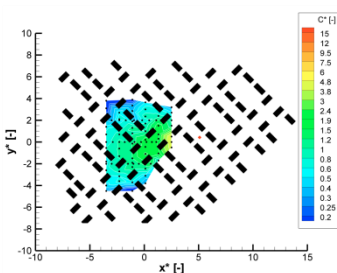
Obr. 13 – Kr90b



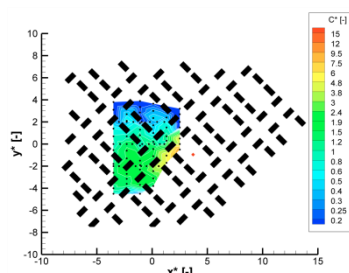
Obr. 14 – Kd0a



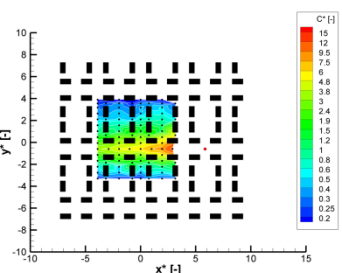
Obr. 15 – Kd0b



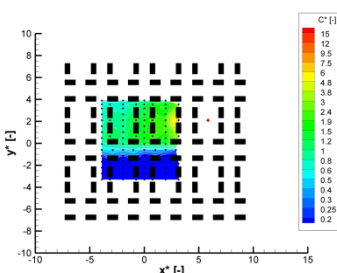
Obr. 16 – Kd45a



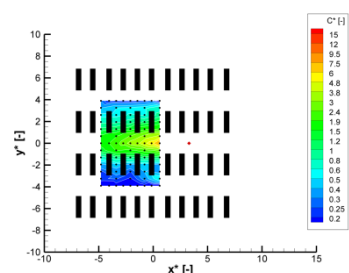
Obr. 17 – Kd45b



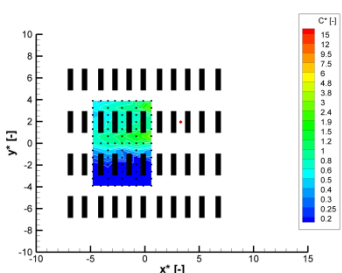
Obr. 18 – Kd90a



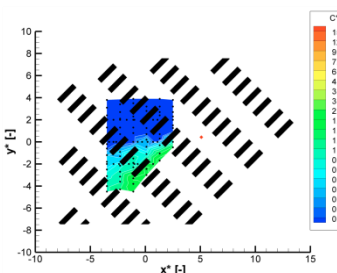
Obr. 19 – Kd90b



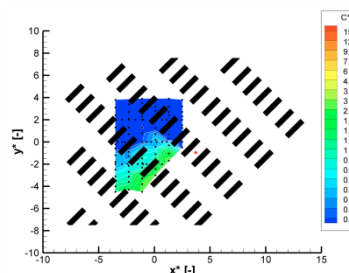
Obr. 20 - Dr0a



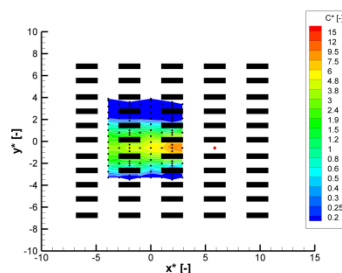
Obr. 21 – Dr0b



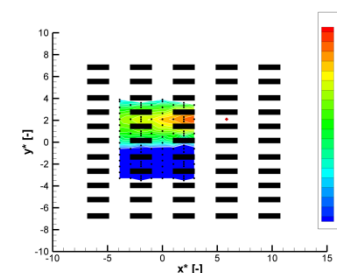
Obr. 22 – Dr45a



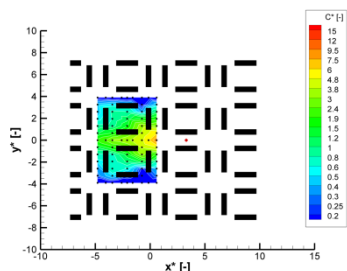
Obr. 23 – Dr45b



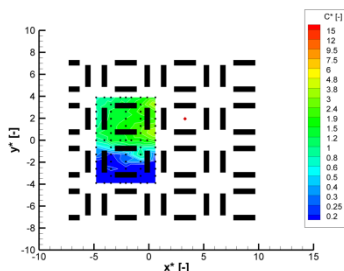
Obr. 24 – Dr90a



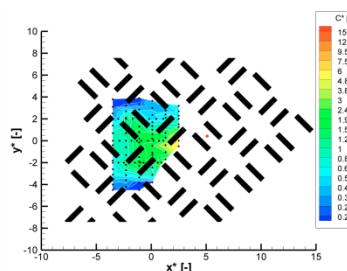
Obr. 25 – Dr90b



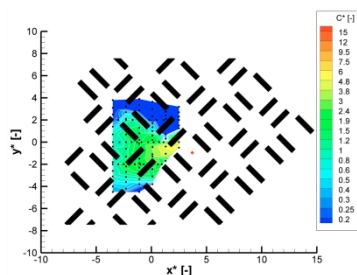
Obr. 26 – Dd0a



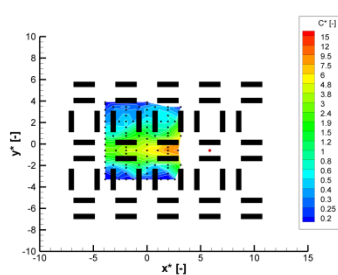
Obr. 27 – Dd0b



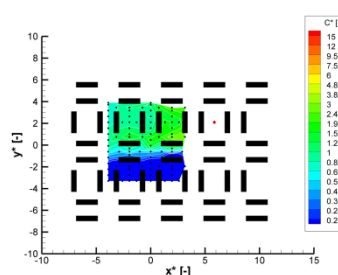
Obr. 28 – Dd45a



Obr. 29 – Dd45b



Obr. 30 – Dd90a



Obr. 31 – Dd90b

Jelikož v realitě jsou zdroje znečištění – automobilová doprava – přítomny spíše na větších silnicích než v postraních ulicích zajišťujících přednostně pouze přístup k jednotlivým domům, rozhodli jsme se ke kvantitativnímu posouzení tvarů jednotlivých sídlišť pro každé uspořádání vzít v úvahu hodnoty C^* změřené při umístění zdroje pouze podél těchto velkých komunikací.

Závěr

Výsledky ukázaly citlivost šíření znečištění na tvar zástavby i směr náběhu proudění na sídliště. Pro námi sledovaná dvě místa měření C^* se z hlediska vypouštění znečišťujících příměsí v rámci dvou na sebe kolmých silnic nejlépe jeví typ zástavby dlouhých rovnoběžných domků. Naopak nejhůře se v našich experimentech jeví krátká dvorovitá zástavba. Obecně lze říci, že menších koncentrací jsme měřili při rovnoběžném rozestavení budov než u dvorů. Menší C^* jsou pro dlouhé než pro krátké domky tvořící sídliště.

References:

- 1) H. Chaloupecká, Proudění a difúze uvnitř městské zástavby, diplomová práce MFF UK (2012)

The Late Heavy Bombardment at various places of the Solar System

Michal Zajaček^{1,*}

1. Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Prague, V Holešovičkách 2, 18000 Prague 8, Czech Republic

* michal_zajacek@yahoo.com

In this work, we study the Late Heavy Bombardment, which took place from 3.8 to 4.1 Gyr, and represents the period of intense collisions whose traces are observed on the Moon mainly in the form of craters or impact clasts [12] [14]. We test a particular dynamical model of the LHB using the observed cratering records on various bodies of the Solar System, which was not done previously to such an extent. Furthermore, our results may be used to constrain the size-frequency distribution of primordial cometary impactors.

We construct a dynamical model of the LHB resembling the so-called “Nice” model [4], which is widely recognized as a suitable dynamical model of the LHB. Using the SyMBA integrator, we simulate the orbital evolution of four giant planets in a compact configuration and a trans-neptunian disk of comets (see Fig. 1). We compute intrinsic collisional probabilities and impact velocities for several bodies of the Solar System, ranging from Mercury to Triton. Their temporal evolution is qualitatively the same, showing an onset of the dynamical instability of the cometary disk and its subsequent dispersal (see Fig. 2). Using the Boulder collisional code, we construct collisional models of the LHB and compute the size distribution of impactor bodies. We then use projectile-crater scaling laws [3] [5] [6] [10] [15] to obtain a list of craters for several target bodies and we also construct relative size-frequency distributions (R-plots) [1].

Most importantly, we compare the synthetic R-plots with those inferred from observations. In general, the best correspondence of our model is for Saturnian icy moons (Dione, Iapetus, Tethys, Phoebe, and Mimas, for example, see Fig. 3). Post-LHB cratering events seem to be negligible and their cratering record may be thus used to constrain the size-frequency distribution of the comets. On the other hand, for the remaining bodies, the synthetic R-values are significantly larger than the observed distributions, which can be explained by various obliterating and resurfacing processes, namely the resurfacing by volcanism and/or tectonic activity, the obliteration of smaller craters by large impacts, wind or water erosion [7]. When we account for these obliterating effects, our dynamical model is consistent with the observed crater records.

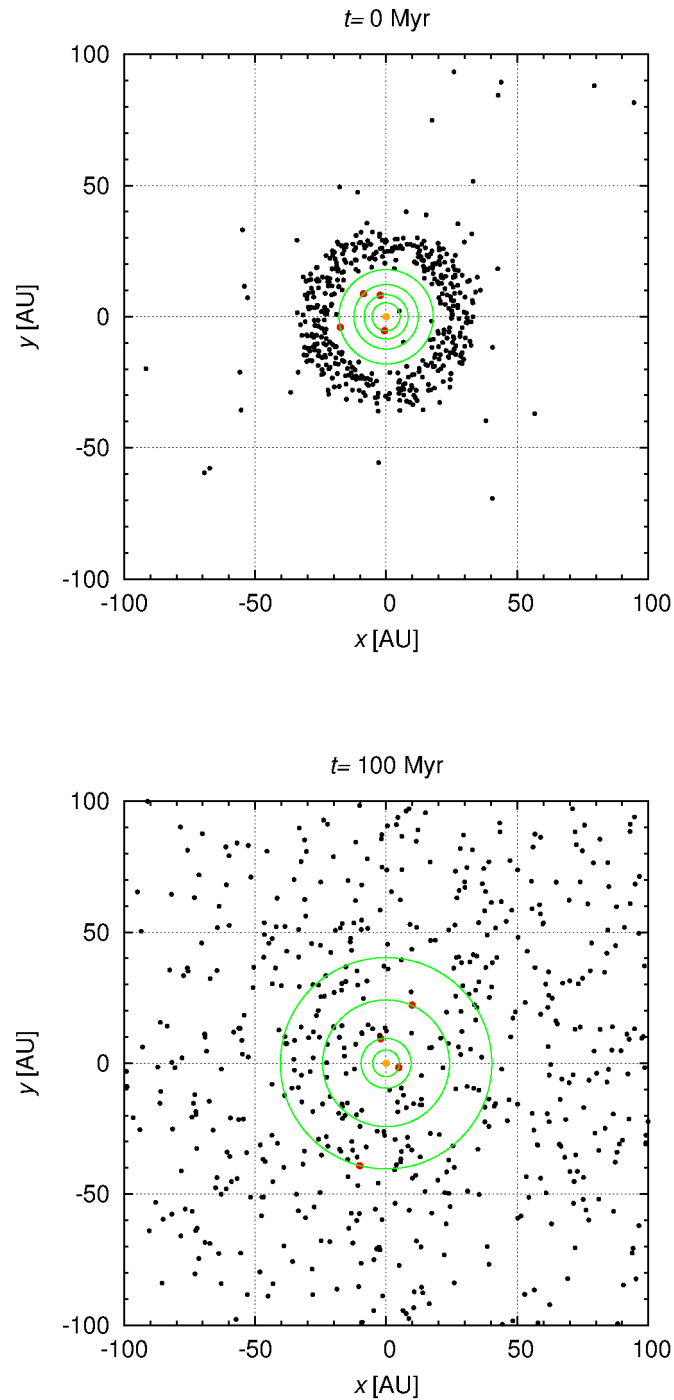


Fig. 1: The configuration of four giant planets and a trans-neptunian disk of comets at $t=0 \text{ Myr}$ and $t=100 \text{ Myr}$. This simulation run resembles the “Nice” model [4].

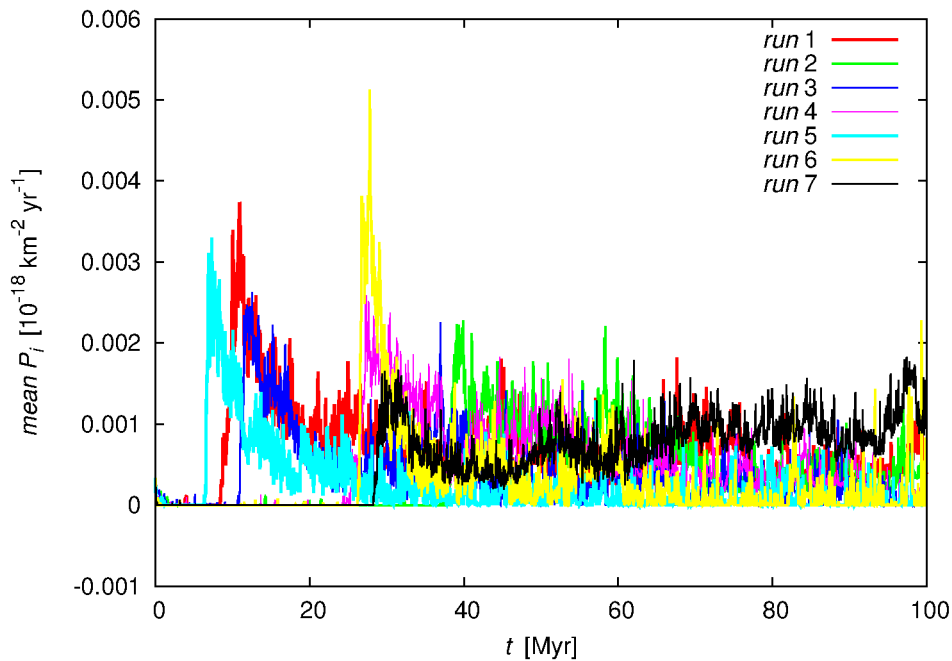


Fig. 2: The temporal evolution of the intrinsic collisional probability of the main asteroid belt with the population of comets for 7 simulation runs.

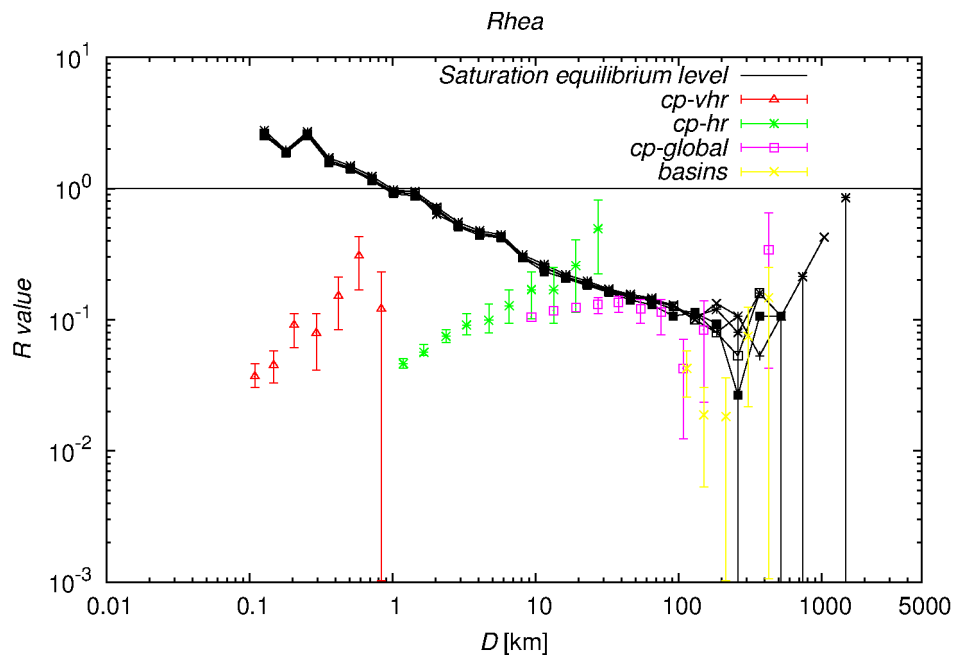


Fig. 3: The example of R-plot for the Saturnian icy moon Rhea. The observational data are taken from [8]. For larger diameter bins, the correspondence is very good within the uncertainty. For smaller diameters, recent impacts are more pronounced. The smaller observational R-value may be due to the obliteration of small craters by large impacts that form basins.

References:

- 1) Crater analysis techniques working group, 1979, *Icarus*, 37, 467
- 2) Duncan, M.J., Levison, H.F., Lee, M.H., 1998, *AJ*, 116, 2067
- 3) Gault, D.E., 1974, *A Primer in Lunar Geology*, 137
- 4) Gomes, R., Levison, H.F., Tsiganis, K., Morbidelli, A., 2005, *Nature*, 435, 466
- 5) Holsapple, K.A, Schmidt, R.M., 1987, *JGR*, 92, 6350
- 6) <http://www.lpl.arizona.edu/tekton/crater.html>
- 7) Ivanov, M.A., Basilevsky, A.T., 2002, *SoSyR*, 36, 447
- 8) Kirchoff, M.R., Schenk, P., 2010, *Icarus*, 206, 485
- 9) Morbidelli, A., Chambers, J., Lunine, J.I., Petit, J.M., Robert, F., Valsecchi, G.B., Cyr, K.E., 2000, *M&PS*, 35, 1309
- 10) Nordyke, M.D., 1962, *JGR*, 67, 1965
- 11) Strom, R.G., Croft, S.K., Boyce, J.M., 1990, *LPI*, 21, 1218
- 12) Strom, R.G., Malhotra, R., Ito, T., Yoshida, F., Kring, D.A., 2005, *Science*, 309, 1847
- 13) Strom, R.G., Woronow, A., Gurnis, M., 1981, *JGR*, 86, 8659
- 14) Tera, F., Papanastassiou, D.A., Wasserburg, G.J., 1974, *Earth & Planet. Sci. Let.*, 22, 1
- 15) Zahnle, K., Schenk, P., Levison, H., Dones, L., 2003, *Icarus*, 163, 263

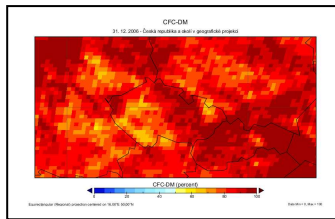
Usage possibilities of the cloud products of satellite datasets

Šácha_Petr *

UK MFF KMOP

* o.o.d.sachta@seznam.cz

Cloudiness plays an important role in the global energy and water cycle. In particular, the presence of clouds dominates the planetary albedo. In this thesis a short theoretical overview of remote sensing, a description of CMSAF and a search retrieval of at first. Then the study is focused on satellite products, especially on CFC sets of daily averages of these with the daily averages of the surface the total cloud cover and cloud type in the area of the Czech Republic. In the case of big variances between the two examined datasets of daily averaged cloud coverage possible causes, like the sampling error and the elevation and type of cloudiness, are studied. Several statistic analyses and validation scores are computed. Finally the temporal and spatial differences are discussed so as the suitability of using the satellite datasets for the objects of applied climatology.



EUMETSAT its part current research is given usage of the cloud and CTY products. Data products are compared SYNOP observations of

References:

Derrien, M., and H. LeGleau, 2005: *MSG/SEVIRI cloud mask and type from SAFNWC. Int. J. Rem. Sens.*, **26**, 4707-4732.

Dybbroe, A., A. Thoss and K.-G. Karlsson, 2005a: *SAFNWC AVHRR cloud detection and analysis using dynamic thresholds and radiative transfer modelling – Part II: Validation. J. Appl. Meteor.* **44**, 55-71.

Dybbroe, A., A. Thoss and K.-G... Karlsson, 2005b: *SAFNWC AVHRR cloud detection and analysis using dynamic thresholds and radiative transfer modelling – Part I: Algorithm description. J. Appl. Meteor.* **44**, 39-54.

Karlsson, K.-G., U. Willén, C. Jones, and K. Wyser (2008), *Evaluation of regional cloud climate simulations over Scandinavia using a 10-year NOAA Advanced Very High Resolution Radiometer cloud climatology, J. Geophys. Res.*, **113**, D01203, doi:10.1029/2007JD008658.

Meteorologický slovník (1993): kolektiv autorů: Meteorologický slovník výkladový a terminologický. MŽP, Praha, 594 s.

Reuter, M.; Thomas, W.; Albert, P.; Lockhoff, M.; Weber, R.; Karlsson, K.-G.; Fischer, J. (2009), The CM-SAF and FUB Cloud Detection Schemes for SEVIRI: Validation with Synoptic Data and Initial Comparison with MODIS and CALIPSO, Journal of Applied Meteorology and Climatology, vol. 48, issue 2, p. 301

Roebeling, R. A., A. J. Feijt, and P. Stammes (2006), Cloud property retrievals for climate monitoring: Implications of differences between Spinning Enhanced Visible and Infrared Imager (SEVIRI) on METEOSAT-8 and Advanced Very High Resolution Radiometer (AVHRR) on NOAA-17, J. Geophys. Res., 111, D20210, doi:10.1029/2005JD006990.

Willén, U., 2008: Preliminary use of CM SAF cloud and radiation products for evaluation of regional climate simulations, SMHI Reports Meteorology and Climatology, 131, 48 pp.

FOTOMETRICKÝ VÝSKUM NOVY V723 CAS

Bc. Zuzana Kreibiková^{1,*}, doc. Mgr. Štefan Parimucha, PhD.¹

1. Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Košice

** KreibikovaZ@gmail.com*

Úvod

Novy sa zaraďujú medzi fyzikálne premenné hviezdy. Sekundárna zložka, hviezda hlavnej postupnosti, vyplnila svoj Rocheho lalok a prenáša časť svojej hmoty na bieleho trpaslíka vo forme plynu. Plyn okolo bieleho trpaslíka krúži, vytvára akréčný disk a klesá na jeho povrch. Po dosiahnutí kritickej hmotnosti plynu sa zapália termonukleárne reakcie. Obrovské množstvo nahromadenej energie vedie ku jadrovej explózií, čo pozorujeme ako náhly nárast jasnosti systému.

Nova V723 Cas

Klasickú novu V723 Cas objavil Yamamoto (1995) 24. augusta 1995. Maximum dosiahla až 16. decembra 1995 (JD 2450068,4) s jasnosťami $V_{max} = 7,09$ mag; $B_{max} = 7,59$ mag a $R_{max} = 6,5$ mag. Na základe pomalej spektrálnej evolúcie Duerbeck (1995) klasifikoval V723 Cas ako veľmi pomalú klasickú novu typu HR Del. Chochol & Pribulla (1997) klasifikovali V723 Cas ako D typ s pomalým vývojom, predĺženým štádiom pred maximom, oddialeným maximom a niekoľkými vrcholmi jasnosti. Pomocou rýchlosti poklesu V a B svetelných kriviek vypočítali absolútne V a B magnitúdy s hodnotami: $M_{V,max} = -6,70 \pm 0,23$ mag, $M_{B,max} = -6,49 \pm 0,32$ mag. Hodnotu farebného excesu stanovili ako $E(B-V) = 0,570 \pm 0,013$. Zodpovedajúce medzihviezdne absorpcie sú: $A_V = 3,1E(B-V) = 1,767 \pm 0,040$ a $A_B = 4,1E(B-V) = 2,337 \pm 0,053$. Vzdialenosť vypočítaná z V dát je $2,54 \pm 0,34$ kpc, z B dát $2,23 \pm 0,42$ kpc a priemerná vzdialenosť je $2,39 \pm 0,38$ kpc. Orbitálnu periódu $P_{orb} = 0,69325$ dňa odvodil Chochol a kol. (2000) analýzou fotometrických pozorovaní. Shugarov a kol. (2005) analyzovali svetelnú krivku, získanú počas rokov 1995–2003. Skonštruované fázové krivky v ročných intervaloch ukázali pravidelné variácie jasnosti s ľahko asymetrickým tvarom. K maximu dochádzalo vo fáze 0,3 – 0,4 a blízko fázy 0,6 bol občas zachytený jemný pokles pripomínajúci sekundárne minimum.

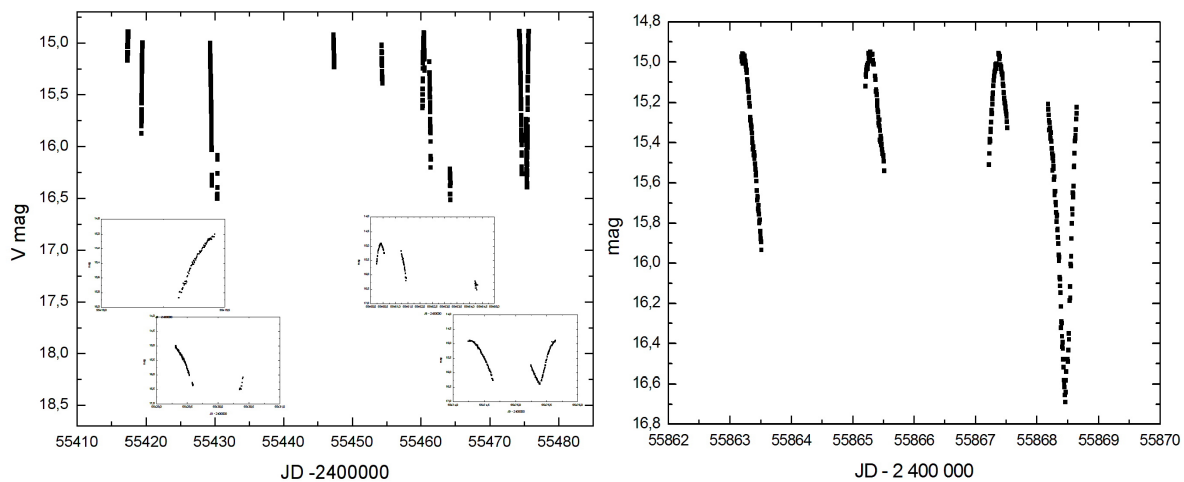
Súčasná pozorovania

Pozorovania V723 Cas v súčasnosti prebiehajú na Astronomickom observatóriu na Kolonickom sedle pomocou Vihorlatského národného teleskopu (VNT), ktorý má vo svojom Cassegrainovom ohnisku umiestnenú CCD kameru. Na kamere je osadená sada štyroch fotometrických $BV(RI)_C$ filtrov. Pozorovania, ktoré analyzujeme v tejto práci, boli získané v roku 2010 počas jedenástich nocí v období od 8. augusta do 5. októbra a v roku 2011 počas štyroch nocí v období od 28. októbra do 2. novembra. Dĺžka jednotlivých expozícií dosiahla v závislosti od jasnosti hviezdy v danom filtri 60s, 120s alebo 180s.

Pred samotnou fotometriou bola prevedená fotometrická kalibrácia CCD snímok s opravou na temnú snímku, flat-field snímku a bias snímku. Vlastná fotometria všetkých hviezd na snímkach bola prevedená pomocou programu C-Munipack¹, ktorý využíva metódu apertúrnej fotometrie. Výsledkom boli inštrumentálne jasnosti všetkých hviezd v použitých filtroch $BV(RI)_C$. Tieto inštrumentálne jasnosti boli následne ešte opravené o atmosférickú extinkciu. Získané mimoatmosférické jasnosti sme následne previedli do medzinárodného systému. Časy pozorovania sme opravili o heliocentrickú korekciu.

Keďže v zornom poli máme viacero hviezd, môžeme výhodne použiť metódu umelej porovnávacej hviezdy. Umelú porovnávaciu hviezdu vytvoríme váženým priemerom všetkých hviezd, pričom váhu určujeme ako $1/\sigma^2$, kde σ je chyba merania. Využitím umelej porovnávacej hviezdy značne znížime rozptyl a šum v dátach, takisto sme schopní odhaliť aj prípadnú premennosť niektorej z porovnávacích hviezd. Zvýšime tým výrazne presnosť určenia jasnosti. Najmä pri slabších objektoch, ako je to aj v našom prípade, je to potrebné.

Svetelné krivky V723 Cas vo filtri V získané v rokoch 2010 a 2011 sú zobrazené na **Chyba! Nenalezen zdroj odkazů.** Obr. 1a–b.



Obr. 1 Svetelná krivka hviezdy V723 Cas vo filtri V pre rok a) 2010, b) 2011.

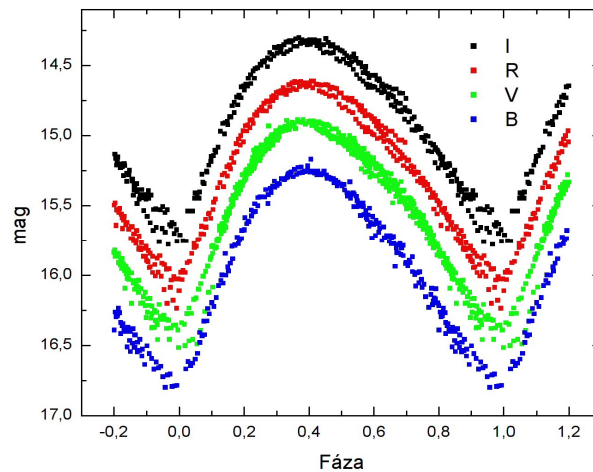
Analýza pozorování

Na periódovú analýzu sme použili všetky naše merania z rokov 2010 a 2011 vo všetkých filtroch. Určenie periódy sme previedli pomocou programu **PerSea**, ktorý využíva metódu ANOVA (Schwarzenberg-Czerny, 1996). Táto metóda je založená na Fourierovej analýze dát, ale je upravená tak, aby sa dala použiť aj na menší počet dát, ktoré nie sú rovnomerne časovo rozložené. Pozorovania v rôznych filtroch sme analyzovali osobitne. Keďže všetky periódy v rámci chyby sú rovnaké, v ďalšej analýze sme použili vážený priemer z týchto periód. Využitím dát vo filtri V zo dňa 10.8.2010 sme určili, že maximum jasnosti nastalo v čase 2455418,8293(4). Použili sme na to polynomický fit tretieho rádu. Výsledná efemerida, ktorá popisuje zmeny jasnosti, je:

$$JD_{\max} = 2455418,8293(4) + 0,693241(4) \times E. \quad (1)$$

Fázová krivka pre pozorovania vo V filtri pre oba roky je na Obr. 2.

¹ Je voľne prístupný na internete: <http://c-munipack.sourceforge.net/>

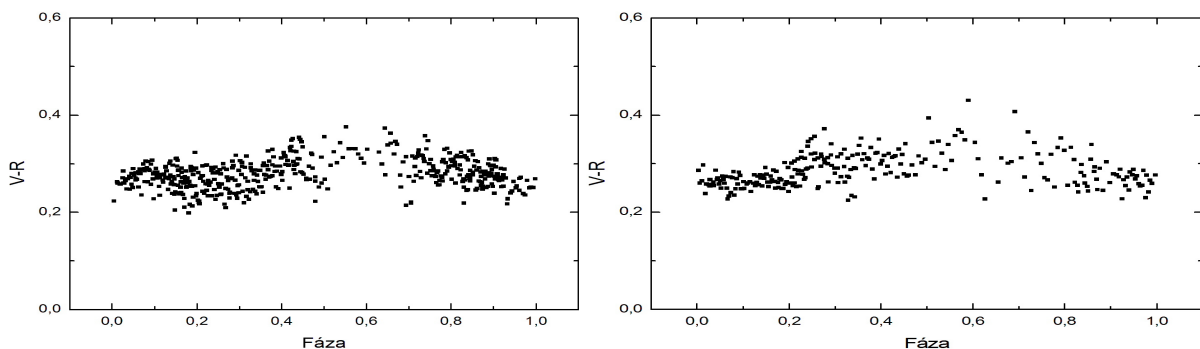


Obr. 2 Fázové krivky hviezdy V723 Cas pre rok 2010

Fázové krivky na Obr. 2 majú zreteľne asymetrický tvar s posunutým maximom do fázy približne 0,4. Maximu predchádza prudký nárast jasnosti z minima a po maxime nasleduje pozvoľnejší pokles. Na fázovej krivke nepozorujeme sekundárne minimum. Rovnako vyzerajú fázové krivky aj pre rok 2011. Takýto tvar krivky zodpovedá pulzujúcej hviezde.

Tento tvar sa zachováva vo fázových diagramoch pre všetky ostatné filtre. Ak by sa jednalo o zákryty, videli by sme v rôznych filtroch rôzne hĺbky minim a náznak sekundárneho minima, spôsobený buď zákrytom primárnej alebo sekundárnej zložky.

Na potvrdenie, že sa jedná o pulzujúcu premennú hviezdu, sme zostrojili priebehy farebných indexov $B-V$, $V-R$ a $R-I$ osobitne pre každý rok pozorovaní. Ak je hviezda pulzujúca, tento trend sa prejaví v nie konštantnom priebehu farebných indexov. Na Obr. 3a-b je znázornený priebeh farebného indexu $V-R$ pre oba roky pozorovania.

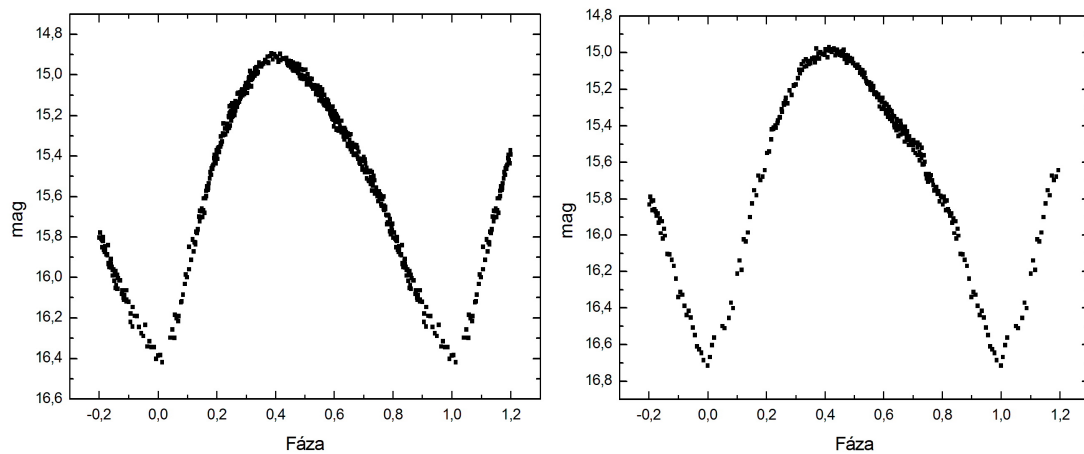


Obr. 3 Priebeh farebného indexu $V-R$ pre rok a) 2010, b) 2011

Z týchto obrázkov je zrejmé, že priebeh farebných indexov nie je konštantný, ale dochádza ku jeho zmene. Takéto správanie sa farebných indexov je ďalším dôkazom o pulzácii sekundárnej zložky premennej hviezdy V723 Cas. Tvar fázovej krivky, dĺžka periódy a amplitúda poukazujú na to, že sa jedná o typ RR Lyr, podtyp RRa alebo RRb.

Pri detailnom pohľade na fázovú krivku pre roky 2010 a 2010 (Obr. 4) môžeme vidieť tri veci: (I) medzi rokmi 2010 a 2011 došlo k zmene maxima a minima, (II) došlo k zmene tvaru svetelnej krivky a (III) aj v rámci jednej pozorovacej sezóny dochádza k menším zmenám tvaru svetelnej krivky, ktorých amplitúda dosahuje vo filtri V približne 0,1. Táto amplitúda je

o jeden rád väčšia než inštrumentálne efekty a teda ide o skutočné správanie sa svetelnej krivky. Rovnaký efekt pozorujeme aj v ostatných filtroch.



Obr. 4 Zmena tvaru svetelnej krivky medzi rokmi 2010 a 2011 vo filtri V

Takéto správanie sa svetelnej krivky pri pulzujúcich hviezdach nazývame Blažkov efekt. Períodu Blažkovho efektu nie sme schopní určiť, pretože máme pozorovania iba z dvoch sezón a jeho perióda je zrejme väčšia ako jeden rok.

Parametre V723 Cas ako pulzujúcej hviezdy

Pri porovnávaní maximálnych jasností v jednotlivých filtroch sme zistili, že najjasnejšia je hviezda vo filtri IC. Z toho vyplýva, že maximum jej vyžarovania je posunutá do červenej oblasti spektra a teda hviezda je chladná. Úvahou, že premenné hviezdy typu RR Lyr majú všetky absolútnu jasnosť na úrovni $M \sim 0,7$ mag, použitím priemernej maximálnej jasnosti vo filtri V a použitím hodnoty pre medzihviezdnu absorpciu, ktorú vypočítali Chochol & Pribulla (1997) z Pogsonovho vzťahu pre modul vzdialenosti dostávame vzdialenosť hviezdy $r = 3,08 \pm 0,03$ kpc.

Záver

V našej práci sa nám detailným štúdiom krátkodobých variácií jasnosti podarilo niekoľkými nezávislými tvrdeniami ukázať, že asymetrický tvar fázovej svetelnej krivky zodpovedá pulzujúcej premennej hviezde typu RR Lyr, podtyp RRA alebo RRb. Períodu pulzácií sme stanovili na $P = 0,693241(4)d$ a určili sme efemeridu hviezdy. Vypočítali sme niekoľko základných parametrov V723 Cas ako pulzujúcej premennej hviezdy. Na stanovenie Blažkovkej periódy budú ešte potrebné ďalšie pozorovania.

Literatúra:

- Duerbeck, H. W. 1995, *VSNET* **310**
 Chochol D., Pribulla T. 1997, *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso*, **27**, 53
 Chochol D. et al. 2000, *IAU Circ. No.* 7351
 Shugarov, S.Yu. et al. 2005, *A&SS*, **296**, 431
 Schwarzenberg-Czerny, A. 1996. *AJL*, **460**, L107
 Yamamoto M. 1995, *IAU Circ. No.* 6213

The Effect of Nitrogen Admixture in Carbon Dioxide on Formation of Ozone in the DC Corona Discharges

Zuzana Lichvanová*
Supervisor: Juraj Országh¹

^{1*}Department of Experimental Physics, Comenius University, Mlynská dolina F2, 842 48
Bratislava

Abstract

The aim of the experiment was simulation of processes present in the atmosphere of Mars. It consists mostly of CO₂ (95%), nitrogen, argon, oxygen, etc. We focused on the effects caused by nitrogen and added different concentration of nitrogen (1%, 3%) into the CO₂. Positive and negative corona discharges were used to initiate plasma-chemical processes. The UV spectrometry was used to analyse discharge products in the gas mixture. We were interested in the influence of nitrogen on formation of ozone as it is considered to be an important biomarker.

Keywords: corona discharge, atmosphere of Mars, ozone, nitrogen, UV spectrometry, carbon dioxide.

1. Introduction

Mars has always been one of the most interesting planets in our Solar system for people especially because of the conditions on its surface. As they are relatively similar to the Earth conditions the question of sustaining life has emerged. Scientists have undertaken a lot of missions to gain basic information about the atmosphere, its composition and about active chemical and physical processes. The Martian atmosphere contains approximately 95.32% of CO₂, 2.7% of nitrogen, 1.6% of argon, some oxygen, ozone, water, etc. This atmosphere does not contain ozone layer therefore UV radiation hits the surface of the planet directly and initiates different elementary processes near the surface. For initialization of these processes in laboratory conditions slow electrons can substitute the UV radiation. These are present in the drift region of corona discharge. Corona discharge was used for atmosphere mimics many times e.g. [1].

Many scientists dealt with corona discharges, dissociation of CO₂ and generation of ozone in Martian atmosphere. F.E. Niles et al. dealt with corona discharge generated in flowing CO₂ in 1970 [2]. They published research about reactions of ionospheric importance in corona. He used air, with admixtures CO₂, NO, NO₂, N₂O. The initial NO density greatly affected the negative and observable positive ion densities.

M. Higashi [3] and H. R. Weiss [4] have proved that concentration of CO₂ in mixture of gases N₂ - CO₂ and pure CO₂ is decreasing in DC corona discharge. Based on that the authors suggested moving part of gas back to combustion chamber of diesel engine because of reduction of excessive emission of CO₂.

Our experiment is part of the Martian atmosphere simulation research. We are focused on the effects of different admixtures in carbon dioxide to evaluate their contribution to the processes

* zuzana.lichvanova@gmail.com

active near the Martian surface. In this experiment we were interested in ozone generation in corona discharge fed by CO₂ and mixtures of CO₂ and N₂ (1%, 3%).

2. Experiment

A scheme of the experimental apparatus is shown in figure 1.

The experiment was carried out at atmospheric pressure and ambient temperature. It was made in flowing regime. The mixture of gases was flowing through the discharge reactor which was located outside the UV spectrometer. Then the gas flowed into the cell of UV spectrometer (Shimadzu). The gas flow rate was kept constant 100 cm³ /min. The used mixtures were pure CO₂, CO₂ + 1% N₂, CO₂ + 3% N₂. Positive or negative corona was used to treat the gas. The discharge current and the voltage on the electrodes were measured by voltmeter and ammeter and recorded using the computer. The UV spectrometer was used to determine the concentration of generated ozone. After each voltage change the system was left to relax for 30 minutes and then the transmittance was determined by the UV spectrometer. The concentration of ozone was calculated according to the Lambert-Beer formula

$$T = e^{-n\sigma l} \quad (1)$$

where T is transmittance of UV light, n is concentration of ozone, σ is ozone absorption cross section of UV light and l is length UV cell. The transmittance was measured near the maximum of the ozone absorption cross section at 255nm.

3. Results and discussion

The current-voltage characteristic for corona discharge is defined as

$$I = \frac{8\pi\varepsilon_0\mu U(U - U_0)}{R^2 \ln R/r_0} \quad (2)$$

where ε_0 is permittivity of vacuum, μ is the average mobility of charged particles, R is radius of outer electrode, r_0 is radius of inner electrode and U_0 is onset voltage. This is semi-empirical formula for coaxial system of electrodes. The current-voltage (CV) characteristics were measured in positive and negative corona discharge fed by pure CO₂ and different mixtures of CO₂ and N₂ (1%, 3%).

Current-Voltage characteristics

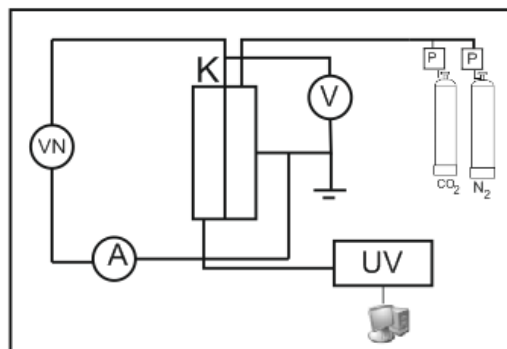


Figure 1. Experimental apparatus (VN- high voltage power supply, A- ammeter, V- voltmeter, K- discharge reactor, UV- UV spectrometer, P- flow controllers, CO₂, N₂-gases)

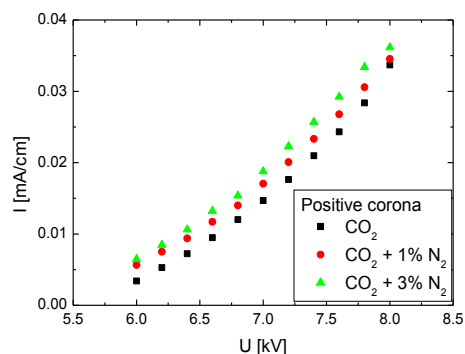


Figure 2. Current- voltage characteristic of positive corona for different gas mixtures.

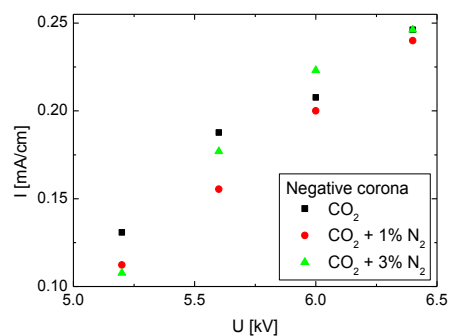


Figure 3. Current- voltage characteristics of negative corona for different gas mixtures.

Discharge current increased quadratically with electrical voltage according to the formula (2). Addition of the nitrogen in small amount caused an increase of the discharge current in positive corona. In negative corona the influence of the added nitrogen in the CO_2 is not clear in comparison to the positive corona. In the negative corona the discharge current is composed of electron and ion components. The electrons have very high mobility in comparison to ions and thus affect the measured discharge current significantly. The values of discharge current used in current-voltage characteristics in both corona were recalculated to current per unit length of the electrodes.

Concentration of ozone

In the figures 4 and 5 the concentrations of ozone in dependence on Becker's parameter η are shown. The Becker's parameter η expresses amount of energy put to the unit volume of the gas by the corona discharge. The Becker's parameter is defined by following formula

$$\eta = \frac{U \cdot I}{Q} \quad (3) \quad \text{where } U \text{ is electrical voltage, } I \text{ is discharge current and } Q \text{ is the gas flow rate.}$$

The concentration of ozone was calculated by formula (1) and transmittance of UV light was determined by UV spectrometer. The concentration of ozone in positive corona dramatically decreased after adding nitrogen to the CO_2 . Even 1% of nitrogen affected the concentration of ozone significantly.

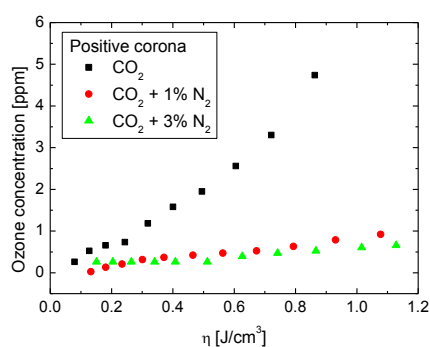


Figure 4. Concentration of ozone depending on Becker's parameter in positive corona

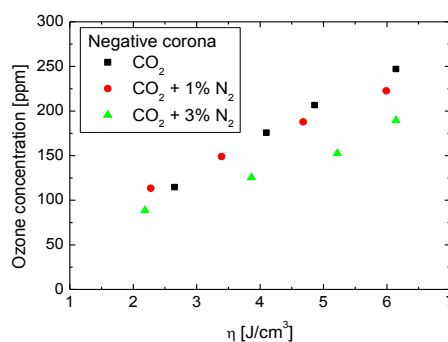
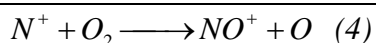


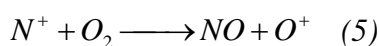
Figure 5. Concentration of ozone depending on Becker's parameter in negative corona

Adding nitrogen to the CO₂ did not influence concentration of ozone in negative corona as significantly as in positive corona. Concentration of produced ozone was approximately hundred times higher than in positive corona.

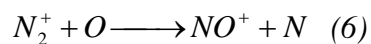
Since the nitrogen is electropositive gas it creates only positive ions. Because of this fact the processes in positive and negative corona are slightly different. In positive corona discharge only the neutral and positively charged particles (positive ions) are present in drift region. On the other hand in the negative discharge only the neutral and negatively charged species (electrons and negative ions) are present in the drift region. In both polarities of the discharge there are ions of both polarities in the ionization region. So in the negative corona there are no nitrogen ions in the drift region and in the positive corona the nitrogen ions are present in the drift region. The ionization regions are similar in both cases. As other experiment parameters are similar in both discharge polarities the presence of nitrogen ions seems to be major difference responsible for the significant ozone diminishing effect in positive corona after adding nitrogen. We suggest that this effect of ozone diminishing can be caused by reactions of nitrogen ions with oxygen atoms and molecules such as



$$k_4 = 2.6 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$



$$k_5 = 3.7 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$



$$k_6 = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$

The reaction rates of these reactions are very high and show that they are very efficient in the chemistry of the discharge. Such reactions are impossible in the negative corona drift region as there are no nitrogen ions present.

4. Conclusion

The results of experiment show that the processes in positive and negative corona discharges are different. The admixture of 1% and 3% of nitrogen caused significant decrease of concentration of ozone in CO₂ in positive corona discharge. On the other hand in negative corona discharge the influence of nitrogen admixture was weak almost negligible. We assume that this difference was caused by the role of nitrogen ions in the drift region of the positive corona discharge.

5. References

- [1] Vušković, L., Ash, R. L., Shi, Z., Popović, S. a Dinh, T.: SAE Paper 972499 (1997).
- [2] Niles, F.E.: The Journal of Chemical Physics, Vol 52, (1970) 408.
- [3] Higashi, M., Sugaya, M., Ueki, K., Fujii, K.: Plasma processing of exhaust gas from a diesel engine vehicle, in Proc. Int. Conf. Plasma Chem, Vol.2, 1985, pp.366-37.
- [4] Weiss, H.R.: Plasma Induced Dissociation of Carbon Dioxide, in Proc. Int. Conf. Plasma Chem., vol.2, 1985, pp.383-388.

PHASE TRANSFORMATIONS AND MICROSTRUCTURE CHANGES IN TIMETAL LCB

Šmilauerová Jana^{1,*}, Janeček Miloš¹, Rack Henry²

1. *Department of Physics of Materials, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University in Prague*

2. *Materials Science & Technology Faculty, Clemson University, USA*

jana.smilauerova@gmail.com

Titanium and its alloys are of great interest due to their outstanding properties such as high specific strength, ductility and excellent corrosion resistance. This makes them ideal for use in automotive and aerospace industry as well as for manufacturing biomedical devices and components in chemical processing equipment. The only drawback, which hinders wider use in all above-mentioned fields, is relatively high cost of titanium [1]. The present work was conducted on one of the metastable β titanium alloys, TIMETAL LCB (Ti-6.8Mo-4.5Fe-1.5Al in wt.%), where LCB stands for Low Cost Beta. This particular alloy was designed to be used primarily for automotive purposes (e.g. suspension springs) and the aim of its development was to produce a low cost alloy by means of selecting less expensive raw materials [2].

The focus of the present work was to characterize the relationships between the evolution of phase composition during ageing and mechanical properties of TIMET LCB titanium alloy. Two initial conditions were prepared by solution treating above β -transus immediately followed by heat treatment in high temperature α/β regime. These resulted in different grain boundary α thicknesses and contiguities at a fixed α volume fraction. The subsequent ageing response of this material was studied by low temperature ageing at 400 °C, 450 °C and 500 °C.

Phase transformations were studied by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), differential scanning calorimetry (DSC) and resistivity measurements. Mechanical properties were investigated using microhardness measurements and tensile tests.

Phase transformations occurring in the studied alloy during heating were examined by differential scanning calorimetry (DSC) and resistivity measurements, see Fig. 1. It was shown that the region I in Fig. 1 corresponds to reversible dissolution of athermal ω phase, which was formed during quenching of the alloy. This diffusionless transformation (as indicated by the reversibility) is a displacive process described in detail e.g. in [3]. During dissolution of ω particles, the β/ω interfaces and related stress fields disappear. This results in decrease in conduction electron scattering and therefore the resistivity drops. Between approximately 210 °C and 370 °C (region II in Fig. 1), the increase in resistivity may be attributed to the formation of isothermal ω by a diffusional and thus irreversible process. Region III corresponds to progressive vanishing of isothermal ω phase through $\omega \rightarrow \alpha$ transformation and $\omega \rightarrow \beta$ dissolution. These two processes lead to the relaxation of stresses in the material, which results in the decrease of the resistivity. The temperature range of approximately 500 °C – 600 °C (denoted by IV in Fig. 1) corresponds

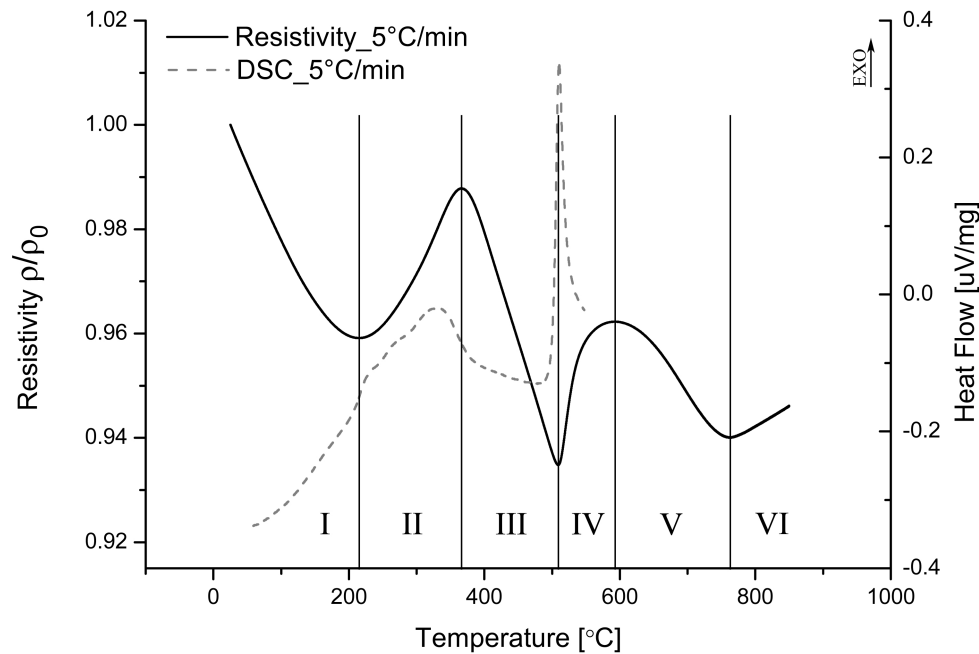


Figure 1: The temperature dependence of resistivity at the heating rate of 5 °C/min (black solid curve) and a corresponding DSC measurement at the same heating rate (grey dashed curve)

to the growth of α phase particles, evidenced also by a sharp peak observed in the DSC data. The subsequent decrease in resistivity in region V in Fig. 1 is caused by dissolution of α phase precipitates due to decreasing equilibrium content of α phase. Naturally, lower amounts of α particles correspond to fewer scattering centres for the electrons and lower resistivity. Finally, at approximately 770 °C, a β -transus is observed as evidenced by an increase in resistivity in the temperature range where only β phase is stable (denoted by VI in Fig. 1).

Microhardness measurements were done to characterize the evolution of mechanical properties accompanying the ongoing phase transformations during isothermal annealing. The variations in the microhardness with ageing time for each condition and ageing temperature are plotted in Fig 2. The highest values of microhardness were reached in samples aged for 400 °C and 450 °C after 256 h and 8 h, respectively. The shift of the maximum of microhardness towards shorter ageing times with increasing ageing temperature indicated that the onset of the phase transformations (ω phase formation and α phase precipitation) leading to higher hardness of the material occurred sooner at higher ageing temperatures.

The X-ray diffraction (XRD) analysis showed the presence of ω phase in all studied samples aged at the lowest temperature (400 °C) up to the longest ageing times. Dissolution of ω phase particles back to β matrix that accompanies the early stages of α precipitation was proved. This is in accordance with the results of resistivity measurements. A quick dissolution of ω particles at 450 °C was observed at the beginning of the low temperature heat treatment. No ω phase was evidenced in the material aged at 500 °C.

The results obtained from scanning electron microscopy (SEM) showed that different secondary α phase morphologies formed in the material during ageing. At the lowest ageing temperature (400 °C) very fine, equiaxed and evenly distributed particles of α phase started to precipitate after 4 h of ageing treatment. The fine dispersion indicated the precipitation of α phase was ω assisted. At 450 °C, similar character of intragranular α phase was observed. Moreover, lamellar α particles became evident in the former precipitate-free zones adjacent to the primary α phase at the grain boundaries (see Fig. 3). At 500 °C, α particles with higher aspect ratio

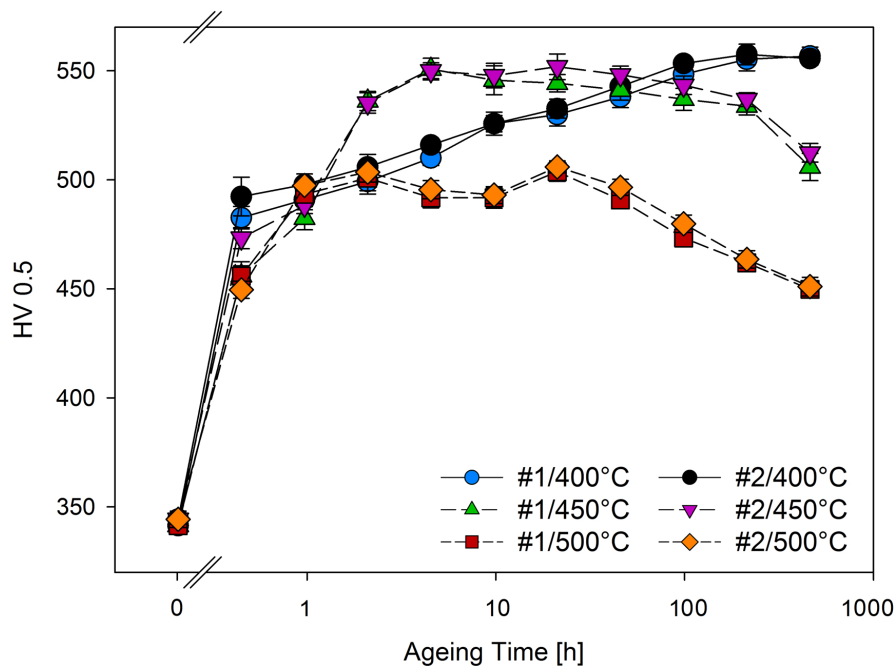


Figure 2: Evolution of microhardness with increasing ageing time; both conditions aged at 400 °C, 450 °C and 500 °C are shown

precipitated in the material. The distribution of these α particles was more sparse and they were much coarser in nature (see Fig. 4).

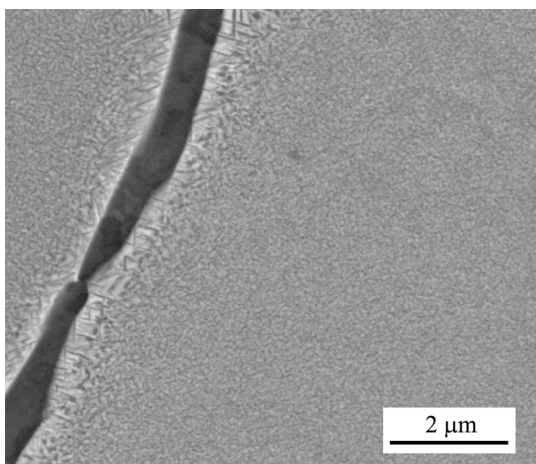


Figure 3: Sample aged at 450 °C for 32 h

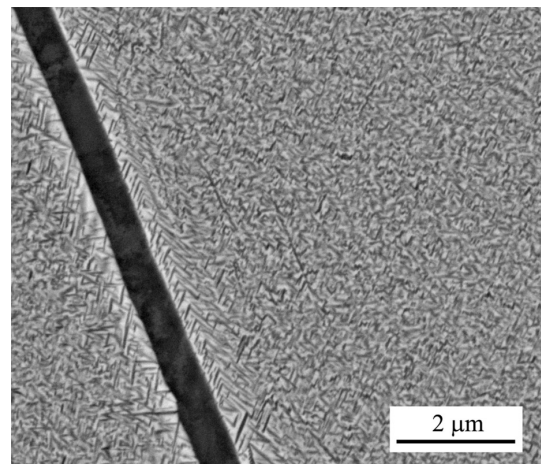


Figure 4: Sample aged at 500 °C for 32 h

Finally, tensile tests were performed on conditions selected based on the results of microhardness and X-ray measurements. These were the samples aged for 8 and 16 h at 450 °C and 500 °C from both initial conditions. The results of the tensile tests are shown in Table 1. The aged material reached high values of strength, however, the ductility was very low. At 450 °C overall lower values of ultimate tensile strength (UTS) were observed compared to the samples aged at 500 °C. Furthermore, the material aged at 450 °C exhibited brittle behaviour and often fractured already in the elastic region of the stress–strain curve as evidenced by Table 1. This

Cond.	Temperature [°C]	Time [h]	UTS [MPa]	$\sigma_{0.2}$	ε_p
1	450	8	1403	N/A	0.00
		16	1280	N/A	0.00
	500	8	1527	1507	0.32
		16	1507	1482	0.41
2	450	8	1493	1470	0.30
		16	1275	N/A	0.00
	500	8	1523	1505	0.30
		16	1514	1468	0.63

Table 1: Tensile properties of aged TIMETAL LCB – ultimate tensile strength (UTS), elongation, yield stress ($\sigma_{0.2}$) and plastic strain (ε_p)

fact could be attributed to some ω phase still present in the samples aged at 450 °C. At 500 °C, approximately the same values of ultimate tensile strength as well as yield stress ($\sigma_{0.2}$ in Table 1) were observed in samples aged for 8 h and 16 h.

References

- [1] G. Lütjering and J.C. Williams. *Titanium*. Springer Verlag, 2007.
- [2] C. Leyens and M. Peters. *Titanium and titanium alloys*. Wiley-VCH, 2003.
- [3] F. Prima, P. Vermaut, D. Ansel, and J. Debuigne. ω precipitation in a beta metastable titanium alloy, resistometric study. *Materials transactions-JIM*, 41(8):1092–1097, 2000.

PULZNÍ MAGNETRONOVÁ DEPOZICE TENKOVRSŤVÝCH MATERIÁLŮ ZE SYSTÉMU Zr-Si-B-C-N

Tomáš Vytisk

Katedra Fyziky, Západočeská Univerzita, Univerzitní 22, Plzeň, 30614, Česká Republika
vytisk@students.zcu.cz

Úvod

Tenké vrstvy Zr-B-C, připravené pulzní magnetronovou depozicí s 15 % Zr v erozní zóně, vykazují vysokou tvrdost až 37 GPa a zároveň nízké kompresivní pnutí 0,35 GPa. Tato vysoká tvrdost je způsobena přítomností nanokolumnární fáze ZrB₂. Nedostatkem těchto vrstev je jejich nízká oxidační odolnost za vysokých teplot (možné použití nejvýše do 650 °C).[1] Ve stejném článku je také ukázáno, že při vytvoření směsi N₂ a Ar v depoziční aparatuře, se zvyšujícím podílem N₂, se zvyšovala oxidační odolnost vrstev Zr-B-C-N až do 800 °C. V článku [2] je popsáno, že přidáním Si do vrstev se výrazně zlepšuje oxidační odolnost vrstev se ZrB₂ strukturou a malým množstvím C. Tyto poznatky byly využity pro přípravu a studium tenkých vrstev Zr-Si-B-C-N s cílem zlepšení oxidační odolnosti vrstev za vysokých teplot s co nejmenší degradací mechanických vlastností.

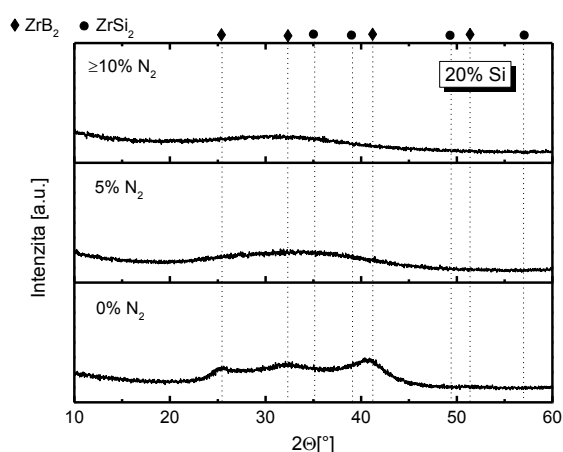
Experiment

Vrstvy Zr-Si-B-C-N byly naprášeny v depoziční aparatuře Balzers BAS 450 PM. Depozice probíhala ve výbojové směsi plynu Ar – N₂ o celkovém tlaku 0,5 Pa. Planární nevyvážený magnetron byl řízen pulzním DC zdrojem s frekvencí 10 kHz a průměrný výkon na terči byl 500 W. Duty cycle (poměr pulz/perioda) byl 85/100. Substráty byly vyhřívány na konstantní teplotu 450 °C. Terč byl tvořen plátem B₄C překrytým destičkami Zr (15% podíl v erozní zóně) a destičkami Si, jejichž podíl v erozní zóně byl 20 % v případě první série a 50 % ve druhé sérii. Podíl N₂ ve výbojové atmosféře se měnil pro obě série stejně 0, 5, 10, 15, 20, 30 a 50 %.

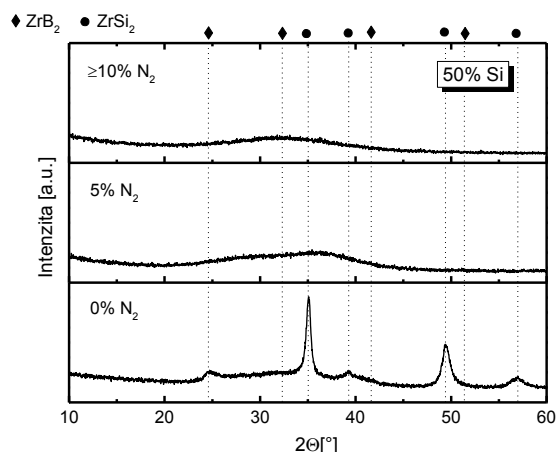
Tloušťka vrstev a jejich ohyb po depozici, ze kterého se pak určuje zbytkové pnutí, byly změřeny na profilometru Dektak 8 Stylus Profiler od firmy Veeco. XDR (X-ray diffraction) analýza vrstev byla provedena za pokojové teploty na PANanalytical XPert PRO MPD pracující v Bragg-Brentanovo geometrii za použití CuK α (40 kV a 40 mA) záření. Pro měření tvrdosti vrstev Zr-Si-B-C-N byl použit mikrotvrdoměr Fischerscope H100 se zatížením 20 mN. Oxidační odolnost vrstev za vysokých teplot byla měřena termogravimetrickým analyzátozem Setaram TAG 2400 za proudění syntetického vzduchu (1 l/h). Rychlost ohřevu systému je 10 °C/min.

Výsledky a diskuze

Difraktogram na obrázku 1 ukazuje fázové složení vzorků první série (20 % podíl Si v erozní zóně). Vzorek deponovaný bez přítomnosti N_2 ve výbojové atmosféře vykazuje dominantní podíl polykrystalická fáze ZrB_2 . Přidáváním N_2 do výbojové atmosféry vznikají zcela amorfni vrstvy, jak dobře znázorňují difraktogramy pro 5 a ≥ 10 % podílu N_2 ve výbojové atmosféře na obrázku 1. U druhé série (s 50 % podílem Si v erozní zóně), zobrazené na obrázku 2, je dominantní strukturou $ZrSi_2$. To je dáno velkým množstvím Si v erozní zóně. Se zvyšováním podílu N_2 v atmosféře, se stejně jako u první série, formuje ve vrstvách amorfni fáze.

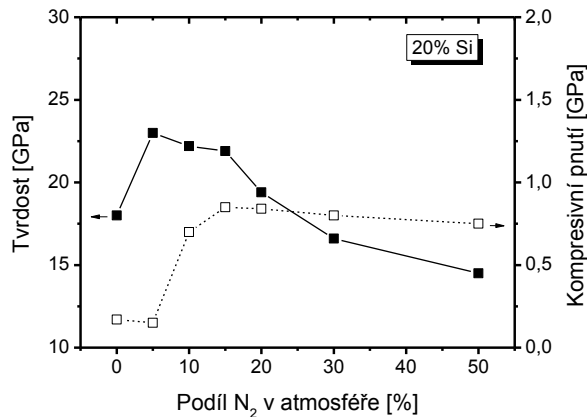


Obr. 1.: První série deponovaná při 15 % Zr a 20 % Si v erozní zóně terče.

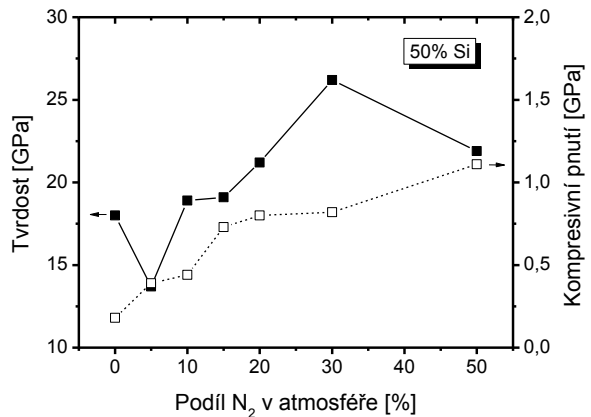


Obr. 2.: Druhá série deponovaná při 15 % Zr a 50 % Si v erozní zóně terče.

Mechanické vlastnosti první série (vrstev deponovaných při 20 % Si) ukazuje obrázek 3. Vzorek deponovaný v čistém argonu vykazuje tvrdost 18 GPa a nízké kompresivní pnutí 0,17 GPa. Po přidání 5% N_2 do výbojové atmosféry tvrdost stoupne až na 23 GPa s mírným poklesem pnutí na 0,15 GPa. Důvodem těchto změn v mechanických vlastnostech může být vznik pevných vazeb Si – N. S dalším zvyšováním podílu N_2 v atmosféře nejprve tvrdost mírně klesne na 22 GPa (pro 15 % N_2), ale kompresivní pnutí vzroste na hodnotu kolem 0,85 GPa. S dalším zvýšením podílu N_2 tvrdost klesá až na 14,5 GPa (při 50 % N_2). Příčinou bude nejspíš vytvoření slabých vazeb B – N. Kompresivní pnutí je téměř konstantní a pohybuje se kolem 0,8 GPa. Mechanické vlastnosti druhé série (50 % N_2) popisují křivky zobrazené v obrázku 4. Vzorek deponovaný v atmosféře bez N_2 vykazuje tvrdost 18 GPa a nízké pnutí kolem 0,18 GPa. Tvrdost vzorku s 5 % N_2 ve výbojové atmosféře klesla na 14 GPa. Tento pokles tvrdosti lze nejspíše přisuzovat vymizení krystalické fáze $ZrSi_2$, které je ukázáno na obrázku 2. Další zvýšení podílu N_2 (30 %) v atmosféře vede ke zvýšení tvrdosti, až na 26 GPa a pnutí vzrostlo na 0,8 GPa. Toto zvýšení tvrdosti se přisuzuje vzniku pevných vazeb Si – N. Pro 50 % podíl N_2 ve výbojové atmosféře klesla tvrdost na 22 GPa, což je nejspíše opět způsobené vytvořením slabých vazeb B – N jako u první série.

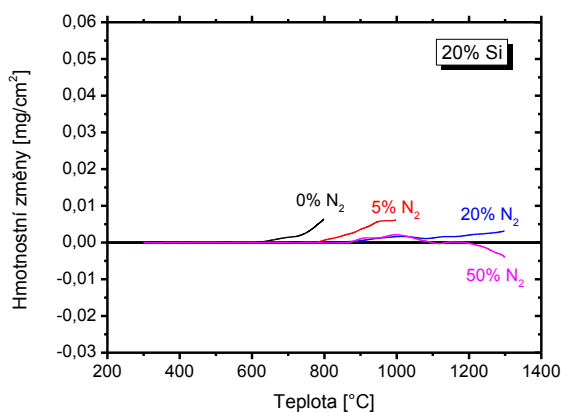


Obr. 3.: Mechanické vlastnosti první série deponované při 15 % Zr a 20 % Si v erozní zóně terče.

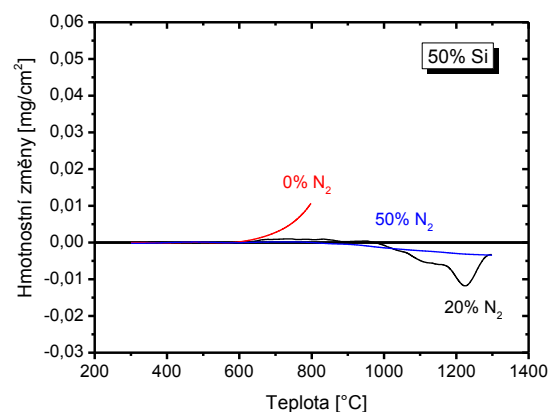


Obr. 4.: Mechanické vlastnosti druhé série deponované při 15 % Zr a 50 % Si v erozní zóně terče.

Na obrázku 5 a 6 jsou zobrazeny křivky termogravimetrické analýzy vrstev Zr-Si-B-C-N první a druhé série. Oxidační odolnost vrstev první série, na obrázku 5, byla měřena jen pro podíl N_2 0, 5, 20 a 50 % ve výbojové atmosféře. Měřené vzorky nevykazovaly žádné hmotnostní změny přibližně do teploty 800 °C. Vzorek s 20 a 50 % podílem N_2 v atmosféře dosahují oxidační odolnosti do 1300 °C (s maximální změnou hmotnosti menší než 0,01 mg/cm²). U druhé série, zobrazené na obrázku 6, byly termogravimetricky analyzovány tři vzorky s podílem N_2 v atmosféře 0, 20 a 50 %. Vzorek deponovaný pouze v argonové atmosféře měl zanedbatelné hmotnostní změny do 600 °C. S dalším zvyšováním teploty jeho hmotnostní změny prudce rostly. Vzorky vytvořené za přítomnosti 20 a 50 % podílu N_2 ve výbojové atmosféře, jsou stabilní do 900 °C a pak dojde k aktivování těkavosti.



Obr. 5.: Oxidační odolnost analyzovaných vzorků první série deponovaných při 15 % Zr a 20 % Si v erozní zóně terče.



Obr. 6.: Oxidační odolnost analyzovaných vzorků druhé série deponovaných při 15 % Zr a 50 % Si v erozní zóně terče.

Závěr

Vrstvy Zr-Si-B-C-N byly připravené pulzní magnetonovou depozicí, rozprašováním B₄C terče s 15 % podílem Zr a s 20 nebo 50 % podílem Si v erozní zóně a proměnným množstvím N₂ ve výbojové atmosféře. Pokud výbojová atmosféra obsahovala pouze argon (0% N₂) vykazovaly vzorky obou sérií krystalickou nebo polykrystalickou strukturu. Už po přidání pouze 5 % N₂ do výbojové atmosféry podíl amorfni fáze začal zcela převládat nad krystalickou strukturou, až se vzorky staly zcela amorfními. U vzorků první série (20 % podíl Si v erozní zóně) bylo dosaženo maximální tvrdosti (23 GPa) a nejnižšího kompresivního pnutí (0,15 GPa), v případě 5 % podíl N₂ v atmosféře. Nejlepší mechanické vlastnosti z druhé série (50 % Si) má vzorek s 30 % podílem N₂ ve výbojové atmosféře. Vykazuje tvrdost až 26,2 GPa za přítomnosti kompresivního pnutí kolem 0,8 GPa. Nejlepší oxidační odolnosti do 1300 °C dosáhl vzorek z první série s 20 % Si v erozní zóně a 20 % N₂ v atmosféře, jehož hmotnostní změny nebyly větší než 0,01 mg/cm².

Reference

- [1] J. Vlček, P. Steidl, J. Kohout, R. Čerstvý, P. Zeman, Š. Prokšová, V. Peřina, předložený k publikaci v Surface and Coatings Technology.
- [2] S. R. Levine, E. J. Opila, M. C. Halbig, J. D. Kiser, M. Singh, J. A. Salem, Journal of the European Ceramic Society 22 (2002) 2757.

Srovnání doutnavého výboje a výboje s dielektrickou bariérou v laserové směsi

Morávek Matěj Jan*

*Katedra fyziky povrchů a plazmatu, Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,
V Holešovičkách 2, Praha 8, 180 00, Česká republika*

* matejmoravek@gmail.com

Tato práce se zabývá studiem výbojového plazmatu ve směsi plynů, používané v tzv. CO₂ laserech, a odvozených směsích. Jedná se o směs CO₂, N₂ a He. Byl zkoumán vliv složení směsi a výbojových parametrů (především tlaku, v rozsahu 266 Pa – 100 kPa) na rozložení energie ve vibračních módech molekuly N₂, které je významným parametrem jak pro modelování výbojového plazmatu, tak pro funkci laseru jako takovou.

Dále byl zkoumán vliv složení směsi na stupeň disociace molekul CO₂ pomocí sledování relativního zastoupení molekul CO ve směsi s cílem nalézt podmínky odpovídající minimální disociaci oxidu uhličitého.

Pro dosažení širokého tlakového rozsahu byly zkoumány dva typy výboje – nízkotlaký stejnosměrný doutnavý výboj pro tlaky od 266 Pa do 1330 Pa a výboj s dielektrickou bariérou (DBD) pro tlaky od 5 kPa do 100 kPa. Oba výboje jsou využívány v komerčních CO₂ laserech.

Hlavní experimentální metodou byla optická emisní spektrometrie. Z optického spektra dusíkových pásů (zejména tzv. druhého pozitivního pásu) byla určována vibrační teplota jako parametr Boltzmannova obsazení vibračních hladin dusíkových molekul. Dále byla ze spektra určována relativní koncentrace CO metodou optické emisní aktinometrie. Jako aktinometr byl použit dusík, z principu přítomný ve směsi. Tento postup byl již dříve navržen Wiegandem et al. [1]. Spektrometrická měření byla doplněna měřeními elektrických vlastností výboje – podélného elektrického pole v doutnavém výboji dvousondovou metodou a měření disipované energie v DBD metodou Lissajousových obrazců [2].

Byla pozorována klesající závislost vibrační teploty na tlaku v obou výbojích a velké zvýšení teploty vlivem zvýšeného výskytu stojících ionizačních vln v doutnavém výboji ve směsích s malým podílem dusíku. Tento fakt byl potvrzen měřeními vibrační teploty podél profilu stojících ionizačních vln. Vibrační teplota ve výboji s dielektrickou bariérou byla znatelně nižší než v doutnavém výboji vlivem rozdílného charakteru výbojů.

Byl pozorován prudký pokles koncentrace CO v doutnavém výboji pro nízké podíly dusíku ve směsi. Nejpravděpodobnější příčinou tohoto jevu byl opět výskyt stojících ionizačních vln. Koncentrace CO v DBD nemohla být spolehlivě určena pro slabý signál molekuly CO a nízkou rozlišovací schopnost použitého spektrometru.

Měření v DBD byla provedena během stáže v rámci programu Erasmus na Faculteit Ingenieurswetenschappen en Architectuur, Universiteit Gent v Belgii. Část výsledků, týkající se stojících ionizačních vln v doutnavém výboji, byla publikována v článku: M. J. Morávek, L. Schmiedt, A. Kaňka, V. Hrachová, Vacuum, Volume 86, Issue 6, 2012, 780-784. Článek s výsledky srovnání doutnavého výboje a DBD je momentálně po recenzním řízení v redakci časopisu Vacuum.

Reference:

- [1] W. J. Wiegand, M. C. Fowler a J. A. Benda: Appl. Phys. Lett. 16 (1970) 237.
- [2] K. G. Kostov et al., Brazilian journal of Phys., vol. 39, no. 2 (2009), 322-325.

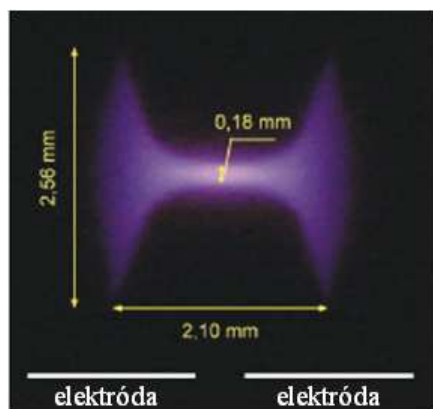
Štúdium vrstvy deponovanej na povrch výbojky počas plazmovej polymerizácie a jej vplyv na plazmu

Ondrej Bogár

Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
bugymir@gmail.com

V práci sme sa venovali štúdiu vrstvy, ktorá vznikala počas plazmovej polymerizácie na povrchu výbojky plazmového zdroja. Prvým cieľom bolo preskúmať vlastnosti vrstvy a jej depozíciu. Druhým cieľom bolo preskúmať interakciu tejto vrstvy s mikrovýbojmi horiacimi na jej povrchu.

Modifikácia povrchov materiálov sa realizuje viacerými spôsobmi priameho pôsobenia plazmy. Patria medzi ne očkovanie v kvapalnej alebo plynnej fáze a plazmová polymerizácia, pri ktorých sa na povrch materiálu nanášajú vrstvy polyméru. Iba v prípade plazmovej polymerizácie je plynný monomér v kontakte s plazmou a aj s povrchom výbojky.

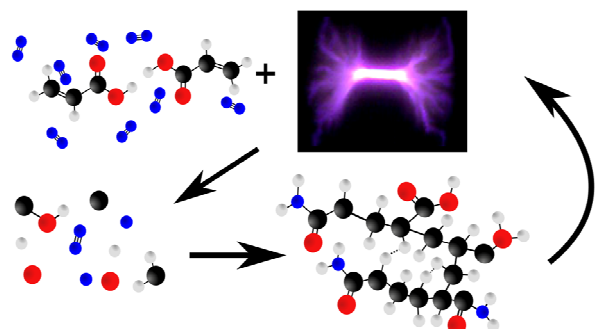


Obr.: 1 Tvar mikrovýboja DCSBD plazmy. Oblasť difúznej plazmy sa nachádza nad elektródami. Kanál filamentárnej plazmy sa formuje medzi elektródami [3].

Ako zdroj plazmy sme použili Difúzny Koplanárny Povrchový Bariérový Výboj (DCSBD). Bol vyvinutý pracovnou skupinou prof. Černáka. Na povrchu výbojky tvorenej keramikou (Al_2O_3) horí vo vrstve 0,3 mm makroskopicky homogénna plazma s plošnou hustotou energie až $5,2 \text{ W/cm}^2$. [1]. Preto je DCSBD vhodný na plošné opracovanie materiálov. Mikrovýboj DCSBD sa vyznačuje typickým H tvarom (Obr. 1). Nad elektródami sa nachádzajú oblasti difúznej plazmy. V medzielektrodovom priestore sa nachádza filamentárna oblasť plazmy. [2], [3]. DCSBD plazma je teplotne nerovnovážna. Ióny nemajú dost' energie na znehodnotenie opracovanej vzorky, ale energia elektrónov je postačujúca na opracovanie povrchu vzorky, aktiváciu metastabilných častíc a radikálov alebo na štiepenie

väzieb monomérov (v plynnej fáze). Teplotný profil mikrovýbojov (rotačné aj vibračné teploty) prezentovali autori v práci [4].

Plazmovej polymerizácii s využitím DCSBD výboja sa venovali práce [5], [6], [7]. Práce preukázali požadovanú zmenu vlastností po plazmovej polymerizácii. Autori v nich konštatujú zanášanie povrchu výbojky polymerizovaným materiálom ale podrobnejšie sa problému nevenujú.



Obr.: 2 Schéma plazmovej polymerizácie AAC.

Pôsobením plazmy dochádza k fragmentácii monoméru, jeho následnej rekombinácii a vytváraniu polymérnych vrstiev na povrchu opracovávaného materiálu, ale aj na povrchu

výbojky (Obr. 2). Tým dochádza k jeho nanášaniu a zmenám charakteru výboja. Nadeponovanú vrstvu na keramickom povrchu výbojky je treba pred opracovaním ďalších vzoriek čistiť. Odstraňovanie nadeponovanej vrstvy je náročné na čas a spôsobuje dodatočnú environmentálnu záťaž. Štúdium procesu depozície vrstvy a jej vplyvu na formovanie mikrovýbojov umožní nastavenie parametrov plazmovej polymerizácie tak, aby bola minimalizovaná potreba čistenia povrchu výbojky pri zachovaní kvality opracovania a modifikácie vzorky.

Za monomér, použitý pri plazmovej polymerizácii, sme zvolili kyselinu akrylovú: C_2H_3COOH (AAc). Po aktivácii tvorí kyselinu polyakrylovú (PAAc). Je to bežne používaný polymér na úpravu povrchov za účelom vytvorenia hydrofilnej vrstvy alebo zlepšenia adhézie. Nanášaniu a analýze vrstiev AAc sa venovalo viacero prác z výskumnej skupiny prof. Černaka. [6], [8], [9].

Experiment

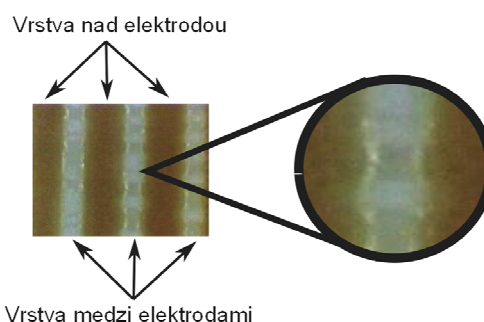
Počas merania sme sledovali tvorbu tenkej vrstvy polyméru na povrchu výbojky. Príkion plazmového zdroja bol 350W, čo predstavuje výkon v plazme $P=260$ W. Prietok dusíka obohateného o pary kyseliny akrylovej (AAc) bol 5 l/min s ohľadom na objem reaktora. Odprašovanie nadeponovanej vrstvy prebiehalo pri otvorenom reaktore za



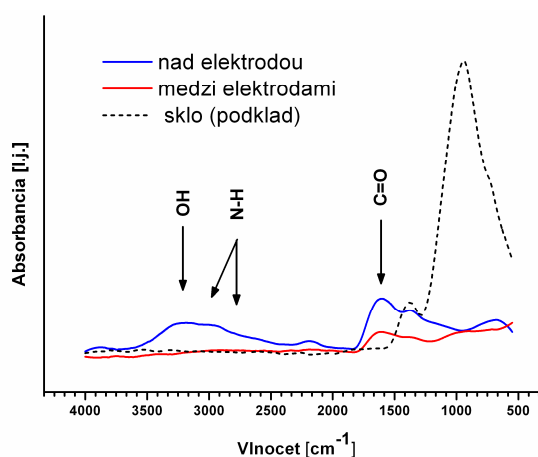
◀Obr.: 4 Reaktor na plazmovú polymerizáciu. Vľavo: kryt reaktoru so "sprchou" na rovnomerné napúšťanie pracovného plynu. Vpravo: celkový pohľad na reaktor s DCSBD výbojkou.

prítomnosti laboratórneho vzduchu. Ako dokumentuje (Obr. 3) k makroskopickému poškodeniu a odstráneniu vrstvy dochádzalo pri voľnom horení plazmy v laboratórnom vzduchu pri časoch nad 5 minút. Konštrukcia plazmového zdroja DCSBD (Obr. 4) neumožňuje in situ analýzu nadeponovanej vrstvy. Preto sme vrstvu deponovali na mikroskopické sklíčko a to následne podrobili analýzám.

FTIR (Fourier transform infrared spectroscopy) analýzou nadeponovanej vrstvy sme určili jej chemické zloženie. Podľa literatúry a podľa predchádzajúcich skúseností pri práci s AAc, sme v IČ spektre hľadali absorbné pásy odpovedajúce väzbám $C=O$, NH_2 a OH . [9] Podľa IČ spektier (Obr. 5) je vrstva tvorená zmesou kyseliny polyakrylovej a polyakrylamidu (PAAm): $C_2H_3CONH_2$.

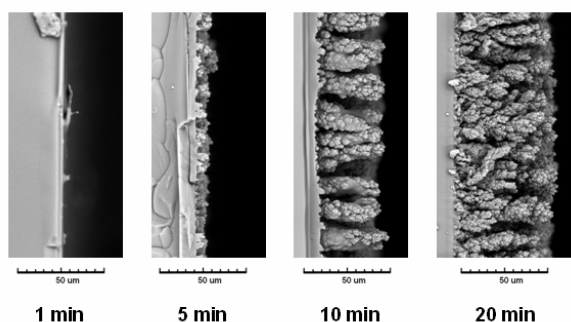


Obr.: 3 Makroskopické poškodenie vrstvy počas odprašovania.



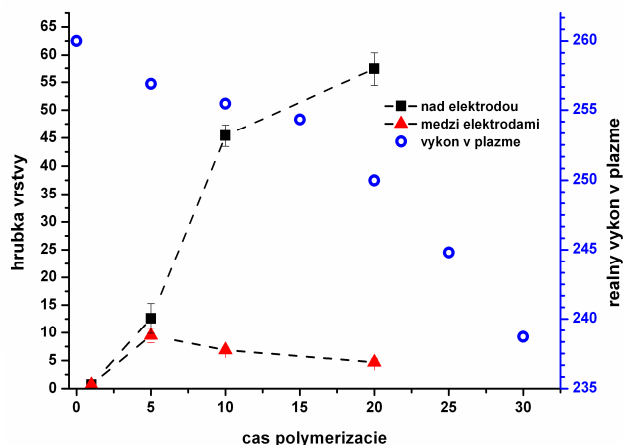
Obr.: 3 ATR-FTIR spektrum nadeponovanej vrstvy. Identifikované absorbné pásy pochádzajú od PAAc a PAAm.

Hrúbku nadeponovanej vrstvy a jej štruktúru sme sledovali pomocou SEM analýzy (Scanning electron microscopy). Obr. 6 zobrazuje rast vrstvy nad elektródou počas polymerizácie. Zo snímok sme určili hrúbku nadeponovanej vrstvy nad elektródami a aj v medzielektrodovom priestore (Obr.7). Nadeponovaná vrstva spôsobuje zvýšenie strát a teda aj zníženie reálneho výkonu v plazme. Stredný výkon v plazme bol meraný pomocou osciloskopických meraní napätia a prúdu.

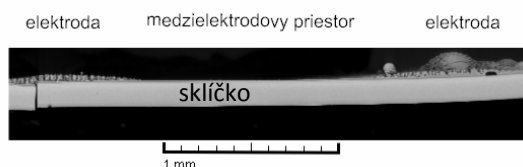


▲ Obr.: 6 Deponovanie vrstvy v oblasti nad elektródou pre rôzne časy trvania polymerizácie.

► Obr.: 7 Hrúbka nadeponovanej vrstvy pre rôzne časy trvania polymerizácie a reálny výkon v plazme prislúchajúci k hrúbkam vrstvy v daných časoch.



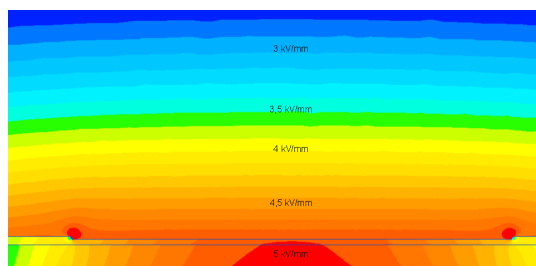
Vrstva sa efektívnejšie deponovala v oblasti horenia difúznej plazmy (Obr. 8). Takto naprášená vrstva ovplyvní tvar elektrického poľa nad keramikou (Obr. 9). Tvar filamentov DCSBD výboja počas horenia plazmy na výbojke s nadeponovanou vrstvou sme sledovali pomocou CCD čipu z web kamery s upraveným objektívom.



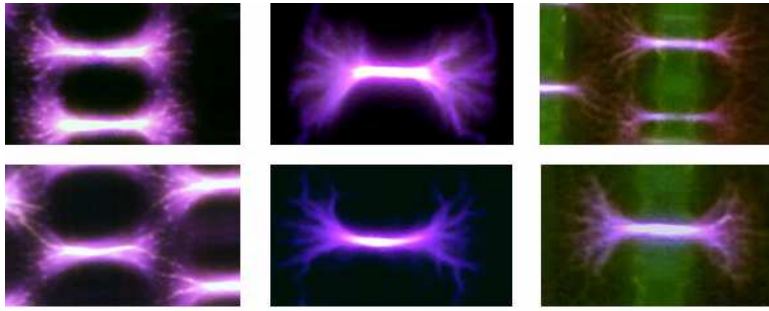
▲ Obr.: 8 Rez nadeponovanou vrstvou.

Hrubá vrstva je lokalizovaná nad elektródami

► Obr.: 9 Simulácia elektrického poľa nad nadeponovanou vrstvou.



Nadeponovaná vrstva spôsobila zánik difúznej oblasti plazmy a celý mikrovýboj mal filamentárny charakter (Obr. 10). Jednotlivé mikrovýboje boli lokalizované. Ani pri výkone 350 W nehorela plazma na celej ploche výbojky. Mikrovýboj po svojej lokalizácii dokázal odprašovať nadeponovanú vrstvu. Avšak ani po uplynutí 30 min nebol výboj schopný samočistenia celej plochy keramiky. Sériou ďalších pokusov sme ukázali, že filamentárna oblasť plazmy, je schopná odprašiť nadeponovanú vrstvu. V skúmanej konfigurácii elektród ale nie je schopná očistiť celú plochu.



◀Obr.: 10 Tvar mikrovýboja DCSBD plazmy horiacej na výbojke s nadeponovanou vrstvou. Oblasť difúznej plazmy je nahradená filamentárnou plazmou. Na snímkach vpravo vidieť oblasť elektród (tmavo).

Výsledky publikované v tejto práci poslúžia ako základ k hľadaniu fyzikálneho mechanizmu na zabránenie depozície vrstvy na výbojku. S tým je spojené aj širšie využitie plazmovej polymerizácie a DCSBD výboja v priemyselných aplikáciách.

Referencie

- 1) Kováčik, D., Surface Modification of Polymer Materials by Atmospheric-Pressure Plasma Induced Grafting, Dizertačná práca, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, 125 – 136, (2006)
- 2) Černák, M., Šimor, M., Ráhel, J., Vojtek, P., Brablec, A., Atmospheric-pressure diffuse coplanar surface discharge for surface treatments. Applied physics letters, 81: 2716 -2718, (2002)
- 3) Černák, M., Černáková, E., Hudec, I., Kováčik, D., Zahoranová, A., Difuse coplanar surface barrier discharge and its applications for in-line processing of low- addedvalue materials. The European Physical Journal - Applied Physics, 47 , (2009)
- 4) Čech J., Sřahel P., Navrátil Z., Černák M., Space and time resolved optical emission spectroscopy of diffuse coplanar barrier discharge in nitrogen. II Central European Symposium on Plasma Chemistry Chemické listy, 102: 1348-1351, (2008)
- 5) Krumpolec R., Modifikácia SiO₂ povrchov plazmovou polymerizáciou pri atmosférickom tlaku, Diplomová práca, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, (2011)
- 6) Masaryk R., Povrchová úprava polymérnych materiálov plazmovou polymerizáciou., Bakalárska práca, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, (2009)
- 7) Szalay Z., Nano-modifikácia povrchu dreva účinkom plazmy generovanej za atmosférického tlaku, Bakalárska práca, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, (2007)
- 8) Bogár O., Hydrofilná úprava polymérnych materiálov plazmou iniciovaným povrchovým očkovaním v plynnej fáze., Bakalárska práca, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, (2010)
- 9) Bogár O., Plazmou iniciované povrchové očkovanie netkaných textílií v kvapalnej fáze, Študentská vedecká konferencia FMFI UK, Zborník príspevkov :120-127, (2011)

KOMPLEXNÝ MATERIÁL KU SKUPINOVÉMU VYUČOVANIU FYZIKY

Bianka Gergel'ová*, Školiteľ: Klára Velmovská

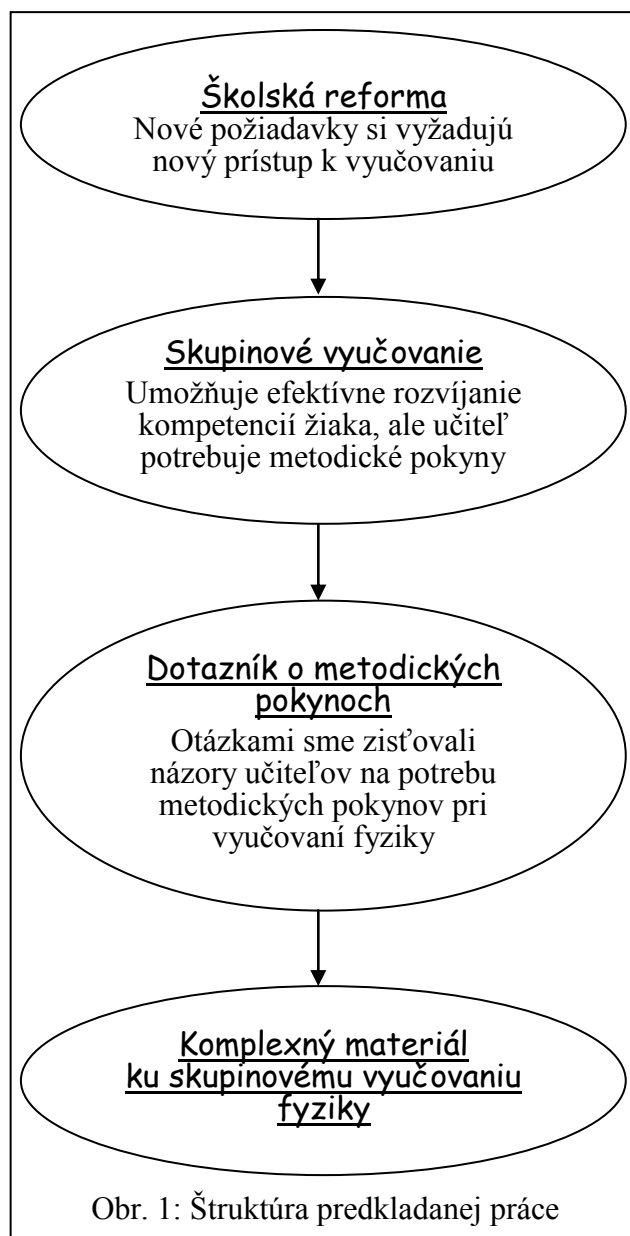
Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

*bianka.gergelova@gmail.com

V nedávnej minulosti prebehla školská reforma, ktorá so sebou priniesla nové požiadavky ako na žiaka, tak i na učiteľa (Štátny vzdelávací program, 2009). Jedným z najdôležitejších poslanií vyučovacieho procesu sa stalo rozvíjanie interpersonálnych a intrapersonálnych kompetencií žiaka. Aby učitelia boli schopní vyhovieť novým požiadavkám, hľadali sme metódu vyučovania, ktorej uplatnenie v praxi by viedlo k efektívnemu rozvíjaniu kompetencií žiaka.

Po preštudovaní charakteristických znakov **metódy skupinového vyučovania** (Petlák, 2004) sme usúdili, že táto metóda vyučovania môže byť veľmi prínosná v rámci vyučovacieho procesu. Metóde skupinového vyučovania sme venovali 1. kapitolu predkladanej práce. Vyššie spomínané charakteristické znaky skupinového vyučovania sú prehľadne načrtnuté na obrázku: *Obr. 2: Charakteristické znaky skupinového vyučovania*. Okrem toho, že táto metóda napomáha k napĺňaniu požiadaviek štátneho vzdelávacieho programu, vedie aj k časovej úspore, ktorá pri súčasnom stave vyučovania fyziky na našich školách je na nezapltenie. Časová úspora pri skupinovom vyučovaní spočíva v skupinovej práci žiakov. Žiaci sú rozdelení do skupín, a namiesto viacerých pokusov realizujú iba jeden, resp. jedným pokusom sa dopracúvajú k viacerým poznatkom. Túto skutočnosť si ukážeme pomocou **Úlohy č.1**, ktorá je súčasťou **Pracovného listu určeného pre skupinu žiakov na SŠ**. Spomínaný pracovný list je súčasťou 3. kapitoly predkladanej práce.

Znenie **Úlohy č.1**: Zistite závislosť veľkosti trecej sily od veľkosti styčnej plochy kvádra s podložkou. Cieľom úlohy je sledovať a zistiť závislosť veľkosti trecej sily



od normálovej sily. Žiaci sú rozdelení na skupiny, pričom každá skupina pracuje s iným materiálom podložky. V podstate každá skupina robí rovnaké meranie, avšak s inou



podložkou. Na záver by každá skupina žiakov mala zistiť, že veľkosť trecej sily závisí priamoúmerne od veľkosti sily, ktorou kváder tlačí na podložku. Avšak keď na záver skupiny prezentujú svoje výsledky, zistia, že napriek rovnakému zadaniu úlohy, získali skupiny rôzne výsledky. V rámci diskusie vhodné kladenými otázkami by mali prísť k záveru, že pre veľkosť trecej sily nie je rozhodujúca len normálová sila, ale i materiál podložky.

Príprava učiteľa na vyučovaciu hodinu, zvlášť v prípade skupinového vyučovania nie je zanedbateľná záležitosť, a treba jej venovať zvýšenú pozornosť. Podľa nás jednou z možností ako pomôcť učiteľovi v jeho prípravách je poskytnúť mu metodické pokyny. V predkladanej práci sme preto zisťovali potrebu metodických pokynov z fyziky, a to prostredníctvom dotazníka. Dotazníkom sme zisťovali nielen ich potrebu, ale aj požiadavky na ne. Dotazník s položkami, grafy prislúchajúce k jednotlivým otázkam a celkové vyhodnotenie dotazníka napĺňa 2. kapitolu predkladanej práce.

Dotazník o metodických pokynoch mal nasledujúcich 5 položiek:

- 1) Ako často používate metodické pokyny pri vyučovaní fyziky?
- 2) V ktorých častiach vyučovacieho procesu by ste vedeli najviac využiť metodické pokyny?
- 3) Uvítali by ste spracovanie väčšiny preberaných tém z fyziky formou metodických pokynov?
- 4) Čo by podľa Vás mali obsahovať metodické pokyny?
- 5) Do akej miery môžu podľa Vás metodické pokyny nahradiť Vaše prípravy na vyučovacie hodiny?

Po analýze dotazníka sme dospeli k nasledujúcemu záveru: Potvrdili sme skutočnosť, že metodické pokyny predstavujú nezastupiteľnú súčasť vyučovacieho procesu. Učitelia sa v dotazníku vyjadrili, že ich využívanie by si vedeli predstaviť pri všetkých častiach

vyučovacieho procesu, t.j. pri výklade, pri pokusoch, pri riešení príkladov, pri opakovaní prebraného učiva, pri preverovaní žiackych poznatkov, atď. Výsledky dotazníka zreteľne poukazujú aj na to, že učitelia by uvítali spracovanie väčšiny prebraných tém z fyziky formou metodických pokynov. Podľa opýtaných učiteľov metodické pokyny by mali byť zamerané najmä na rozširujúce informácie k danej téme, a na návody na experimenty. Metodické pokyny nie sú písané s cieľom, aby učiteľove prípravy nahradili, ale s cieľom, aby učiteľovi pomáhali v rámci vyučovacej jednotky.

Tretia kapitola predkladanej práce prináša ukážku komplexného materiálu, ktorý je spracovaný na tému: **Trenie. Trecia sila a jej meranie.**

Komplexný materiál je v skutočnosti výsledkom aplikácie:

- 1) metódy skupinového vyučovania,
- 2) záveru dotazníka.

Po preštudovaní základných znakov metódy skupinového vyučovania sme boli povzbudení preštudovanú metódu aplikovať v praxi. Pripravili sme si vyššie spomínaný **Pracovný list určený pre skupinu žiakov na SŠ**. Výsledok dotazníka nás znova podnietil k tomu, aby sme k hotovému pracovnému listu pripravili aj príslušné metodické pokyny. Pracovný list s metodickými pokynmi tvoria spolu komplexný materiál. Metodické pokyny sme sa snažili pripraviť na základe požiadaviek učiteľov, ktoré vyjadrili pri vyplňovaní dotazníka.

Ukážka komplexného materiálu:

Metodické pokyny pozostávajú:

- 1) zo všetkých bodov z pracovného listu,
- 2) z metodických pokynov, ktoré patria k príslušným bodom pracovného listu,
- 3) z príkladu vypracovania pracovného listu.

Pracovný list určený pre skupinu žiakov na SŠ (časť)

Úloha č. 1: *Zistite závislosť veľkosti trecej sily od veľkosti styčnej plochy kvádra s podložkou.*

Postup:

-
- 7.) Do grafu (Graf. 1) znázorníte závislosť veľkosti trecej sily od veľkosti styčnej plochy dreveného kvádra.
-

Diskusia:

-
- 9.) Pokúste sa vysvetliť, prečo každá skupina určila rôznu hodnotu veľkosti trecej sily.

Metodické pokyny: Pracovný list určený pre skupinu žiakov na SŠ (časť)

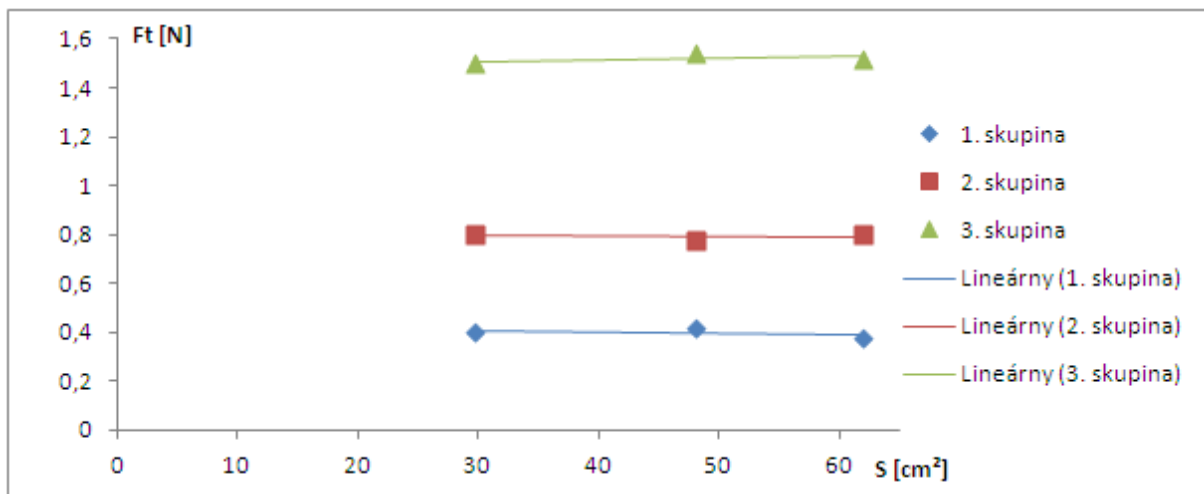
Úloha č. 1: *Zistite závislosť veľkosti trecej sily od veľkosti styčnej plochy kvádra s podložkou.*

*Zo strany žiakov môže padnúť otázka: „Čo znamená styčná plocha kvádra?“
Keď je kváder položený na podložku, styčnou plochou nazveme plochu, ktorá sa dotýka podložky.*

Postup:

7.) Do grafu (Graf. 1) znázorníte závislost' veľkosti trecej sily od veľkosti styčnej plochy dreveného kvádra.

Nasledujúci graf znázorňuje tri závislosti veľkosti trecej sily od veľkosti styčnej plochy kvádra. Tieto tri závislosti prislúchajú trom tabuľkám, pričom každá tabuľka patrí inej skupine. Kvôli porovnaniu výsledkov jednotlivých meraní sme závislosti znázornili do jedného grafu.



Graf 1: Graf závislosti veľkosti trecej sily od veľkosti styčnej plochy dreveného kvádra

Diskusia:

9.) Pokúste sa vysvetliť, prečo každá skupina určila rôznu hodnotu veľkosti trecej sily. Keďže veľkosť trecej sily nezávisí od veľkosti styčnej plochy, môže závisieť len od drsnosti podložky, alebo od hmotnosti. Pri tejto úlohe sme neskúmali závislosť veľkosti trecej sily od hmotnosti. Vieme však, že každá skupina pracovala s inou podložkou. Nakoľko každá skupina pracovala s inou podložkou, a každá skupina určila inú hodnotu trecej sily, hodnota trecej sily bude závisieť od drsnosti podložky (od koeficientu trenia). Čím drsnejšia podložka, tým väčšia hodnota trecej sily. Preto určila každá skupina rôznu hodnotu, pretože každá skupina pracovala s inou podložkou.

Zoznam bibliografických odkazov

PETLÁK, E. 2004. *Všeobecná didaktika*. 2. vyd. Bratislava : Iris, 2004. 311 s. ISBN 80-89018-64-5.

Štátny vzdelávací program, FYZIKA. 2009. Príloha ISCED 3. 1. upravená verzia. [online]. Bratislava : Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu. [cit. 2012-04-11]. Dostupné na [www:<http://www.iedu.sk/vyucovanie_a_studium/vyucovacie_predmety/xKatalog_Dokumenty/Fyzika%20ISCED%203.pdf>](http://www.iedu.sk/vyucovanie_a_studium/vyucovacie_predmety/xKatalog_Dokumenty/Fyzika%20ISCED%203.pdf).

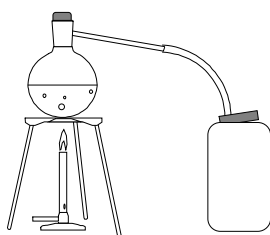
ČO V SEBE SKRÝVA TEPELNÁ VÝMENA PRI KONDENZÁCII VODNÝCH PÁR V NASÝTENÝCH ROZTOKOCH?

Pásztorová Jana*

1. Affiliation

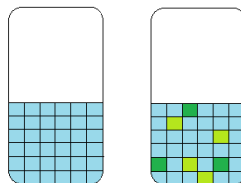
* author_pasztorovaj@gmail.com

Náš problém pochádza zo zadania jedného z problémov Turnaja mladých fyzikov (rok 2006, „Teplota a teplota“). Ako sme zistili, závery mnohých riešení boli rozpačité a úloha vyvolávala problémy. Aké bolo zadanie? Bolo nutné si zostaviť danú aparaturu, podľa ktorej boli pary vriaceho rozpúšťadla (v našom prípade vody) vháňané do roztoku chloridu sodného. Čo sa udeje? Pozoruhodné je hlavne, že



teplote ako je teplota varu fenomén zapríčinený? Dá sa vypracovať adekvátne riešenie experimentmi a hypotézami. upravili aparaturu na meranie literatúry sme spísali teóriu k experimentu. Definujme si teraz základnú otázku - prečo dochádza k zvýšeniu bodu varu roztokov? Prekvapivé je, že tento jav nie je entalpickým, ale entropickým javom (a že je tomu skutočne tak, sa presvedčíme aj pri jednej z našich hypotéz). Hlavnú úlohu tu zohráva neusporiadanosť systému a fázové premeny, ku ktorým dochádza. Princíp je jednoduchý. Entropia čistého kvapalného rozpúšťadla odráža neusporiadanosť jeho molekúl. V prítomnosti rozpustenej látky je tu dodatočný príspevok k entropii kvapaliny, a to aj v prípade ideálneho roztoku. Pretože entropia kvapaliny v roztoku je vyššia než v čistej kvapaline, zníži sa tým tendencia k vyparovaniu. Účinok rozpustenej látky sa prejaví v znížení tlaku pary a tým vo zvýšení bodu varu. Laicky povedané – čím vyššia neusporiadanosť, tým menšia tendencia k vyparovaniu (vyparovanie z celého objemu – var), teda tým vyššia teplota varu

kvapaliny predstavuje rovnováhu medzi neusporiadanosti vyparovaním kondenzáciou. Na prvom obr. je schematicky znázornená štvorčekovou rozpustená látka (obr. dva), ktorá je



štvorčekmi, je neusporiadanosť kondenzovanej fázy relatívne vyššia ako v čistej kvapaline, a preto je tendencia zvýšiť svoju neusporiadanosť vyparovaním znížená. Odvedením cez chemický potenciál sme získali aj vzťah pre nárast teploty varu, ktorý obsahuje aj tzv. ebulioskopickú konštantu (závisí od druhu rozpúšťadla). Týmto sme viac-menej uzavreli potrebnú teóriu. Ako sme postupovali? Najskôr sme vytvorili vlastnú modifikáciu aparatury – umožňovala nám zhotoviť dobrú fotodokumentáciu priebehu javu a mohli sme popísať, čo sa v ktorom okamihu deje. Nevýhodou navrhovanej aparatury bolo, že sa roztok mal nachádzať v termoske a teda neumožňoval sledovať priebeh kondenzácie bublín. Využili sme aj inštaláciu trojcestného ventilu, vďaka ktorému sme mohli do roztoku vháňať priamo pary

roztok bude vrieť pri vyššej rozpúšťadla (vody). Čím je daný objasniť? Rozhodli sme sa daného problému s našimi novými Mimo základných cieľov sme ešte teplôt. Po preštudovaní vhodnej

roztoku. Tlak pary čistej zvyšovaním a znižovaním štruktúra kvapaliny sieťou. Ak je prítomná zachytená zelenými

roztoku. Tlak pary čistej zvyšovaním a znižovaním štruktúra kvapaliny sieťou. Ak je prítomná zachytená zelenými

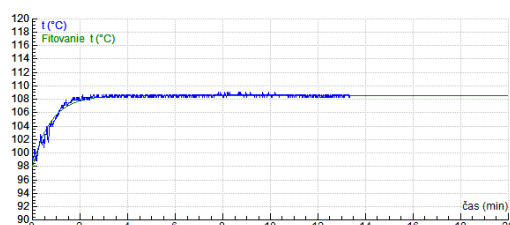
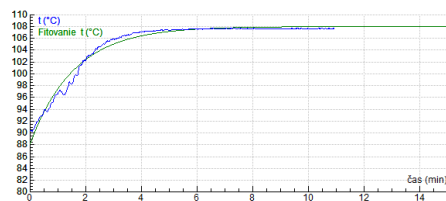
vriacej kvapaliny). Za jednu z prvých úloh sme si stanovili vytvorenie fotodokumentácie a prevedenie overovacieho experimentu nezávadnosti aparatury v pokuse voda – voda. Skutočne nebol pozorovaný nárast teploty ($99,1^{\circ}\text{C}$). Je na čase položiť si druhú kľúčovú otázku – prečo bubliny kolabujú, aj keď majú teplotu nižšiu ako okolitý roztok? Zo začiatku je situácia jasná. Teplejšie pary vchádzajú do studenšieho roztoku a ohrievajú ho (t.j. dochádza k tepelnej výmene). Bublíny takmer okamžite kondenzovali v blízkosti rúrky, ktorou sme do trubice vháňali paru.

naďalej kondenzujú, unikajúce zmenšujúce sa skôr ako dosiahli paradox pokusu, lebo zmenšujúcim sa

by sa mal objem stúpajúcej bubliny zväčšovať. V našom prípade kondenzácia spôsobuje presne opačný efekt

Zlomová je teplota keď je jeho teplota vháňaných pár. Bez poznatkov by sme predpokladali, že Z našich teoretických

vyplývalo, že práve pridaním zlučiny, teda vytvorením roztoku, sa z dôvodu zníženia chemického potenciálu a nárastu entropie (neusporiadanosti systému) zvýši bod varu. Vieme veľmi dobre, že var môžeme definovať ako vyparovanie, ktoré prebieha z celého objemu kvapaliny. A rovnako, že čím bude vyššia entropia systému, tým bude menšia tendencia k vyparovaniu. Čím menšia ochota k vyparovaniu – tým dlhšie potrvá, kým dosiahneme teplotu varu. Vo fáze, keď ešte nie je dosiahnutá teplota varu, ale roztok ju už čochvíľa nadobudne môžeme sledovať, že pár bublín dosiahne až hladinu a unikne, ešte stále ale prevažná väčšina kolabuje a skondenzuje pred dosiahnutím hladiny. V bode varu sledujeme „klasické varné“ bubliny, celý roztok vrije, už nedochádza ku kondenzácii. Následne sme náš experiment realizovali s rôznymi roztokmi – chloridom draselným, jodidom draselným a síranom lítnym. A teploty zaznamenali v programe Coach, ktorý nám výsledky pomohol vyhodnotiť, zobrazil grafy a umožnil ich fitovanie vhodnou funkciou. Ako najvhodnejšia sa ukázala exponenciálna funkcia a v práci je podrobne rozpísaná ku každej zlučiny. Teraz hádam toľko, že teplota varu chloridu sodného bola $107,98^{\circ}\text{C}$, chloridu draselného $108,6^{\circ}\text{C}$, v prípade jodidu draselného to bude $117,3^{\circ}\text{C}$ a síranu lítneho $101,8^{\circ}\text{C}$. Na začiatku sme tiež vyslovili hypotézu, že charakter rozpustnosti ovplyvňuje teplotu varu roztokov. Táto hypotéza sa nám nepotvrdila, ale zároveň podporila fakt entropického a nie entalpického charakteru zdôvodnenia. Člen c sa značne podobá hodnotám teploty varu danej zlučiny. Túto rovnicu ešte analyzujeme, aby sme mohli vysloviť jednoznačné závery. Nakoniec sme sa snažili prepojiť teóriu a získané výsledky a to s jednoduchým vzťahom pre výpočet nárastu teploty s využitím ebulioskopickej konštanty. U väčšiny prípadov vyšla veľmi presne, u druhých vykazovala menšiu chybu. Experiment sme realizovali aj s chladivou kvapalinou, pokus ale nemá veľmi použiteľné výsledky nakoľko sa s časom dorieďuje. V práci sme dosiahli stanovené ciele. Podarilo sa nám vytvoriť vzorové riešenie problému „Teplota a teplota“, ktorý



V ďalšom priebehu pary sledovali sme ich ako bubliny, ktoré zanikli hladinu, čo je ďalší obecné platí, že so hydrostatickým tlakom správania sa bubliny. roztoku v okamihu, rovnaká ako teplota akýchkoľvek pravdepodobne dôjde k varu. poznatkov ale

bol jednou z úloh Turnaja mladých fyzikov. Teória je podoprená početnou fotodokumentáciou a grafmi, ktoré odpovedajú roztokom chloridu sodného (teplota varu 107,6 °C), chloridu draselného (teplota varu 108,5 °C), jodidu draselného (teplota varu 117,7 °C) a síranu lítneho (teplota varu 101,8 °C). Získané grafy sme fitovali exponenciálnou funkciou, čo nám poskytlo matematické vyjadrenie závislosti teploty roztoku od času. Je pravdepodobné, že člen c je samotnou teplotou varu roztoku. Poskytli sme kompletne riešenie a zdôvodnenie tohto fenoménu cez chemický potenciál a entropiu. Zároveň sa nám nepotvrdila závislosť medzi teplotou varu a charakterom rozpúšťania danej látky. Aj keď sa jej rozpustnosť s teplotou znižovala, sledovali sme zvýšenie teploty varu. Z tohto faktu môžeme vyvodzovať, že ku zvýšeniu teploty varu dochádza zakaždým, ak je do rozpúšťadla (v našom prípade voda) pridaná zlúčenina. Potvrdila sa nám aj správnosť použitej teórie, ktorej teoretické výsledky boli veľmi blízke nám nameraným hodnotám – chlorid sodný mal experimentálnu hodnotu teploty varu 107,6 °C (teoreticky 107,5 °C), chlorid draselný teplotu 108,5 °C (teoreticky 108,0 °C), jodid draselný 117,7 °C (teoreticky 113,4 °C) a síran lítny 101,8 °C (teoreticky 103,2 °C). Voda ako rozpúšťadlo má nízku ebullioskopickú konštantu, preto sa pri ebulliometrii používa len zriedkakedy. V prípade použitia kvapaliny, do ktorej sú vháňané pary, nie je možné získať graf podobný grafom pre roztoky s tuhým rozpúšťaním látkou, pretože nevieme vytvoriť roztok ustavične nasýtený, nakoľko je zriedňovaný vháňanými parami a krivka postupne klesá smerom dole. Na záver môžeme skonštatovať, že sa nám podarilo vytvoriť jednoduchú formu ebulliometru, ktorý sa dá postaviť aj z obyčajného laboratórneho vybavenia, a môže veľmi dobre poslúžiť na objasnenie pojmov var, kondenzácia a zvyšovanie teploty varu pri práci s talentovanou mládežou alebo použitím pri popularizačných prednáškach z fyziky.

References:

- 1) Teplo a teplota (zadanie turnaja mladých fyzikov). 2006.
- 2) KOHOUT J., MELNÍK M.: Anorganická chémia 1 (Základy anorganickej chémie). Bratislava: Vydavateľstvo STU v Bratislave, 1997, 2.vydanie. s. 57, 68, 69, 70, 72. ISBN 80-227-0972-7
- 3) KIREŠ, M.: Var kvapaliny (učebná pomôcka). Košice
- 4) KROSCWITZ I.J., WINOKUR M.: Chemistry: General, Organic, Biological. McGraw-Hill College, 1990, 2.vydanie. s. 219. ISBN 0-07-035546-0
- 5) FISCHER O. a kol.: Fyzikální chemie (Termodynamika, Elektrochemie, Kinetika, Koloidní soustavy). Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1983, 1.vydanie. s. 47, 48.
- 6) GÁLOVÁ M. a kol.: Výpočty z fyzikálnej chémie (skriptum). Košice: Prírodovedecká fakulta UPJŠ, 1999. s. 50.
- 7) ATKINS, P.W.: Fyzikálna chémia (časť 1). Oxford: Oxford University Press, 1999, 6.vydanie. s. 188, 194, 195, 328. ISBN 0-19-850101-3

- 8) HALLIDAY D., RESNICK R., WALKER J.: Fyzika (Vysokoškolská učebnice obecné fyziky). Praha: Nakladatelství VUTIUM a PROMETHEUS Praha, 2000, 1.vydanie. s. 553, 554, 558. ISBN 80-214-1869-9
- 9) HÁLA E., PICK J., FRIED V., VILÍM O.: Rovnováha kapalina – pára. Praha: Nakladatelství československejakademievěd, 1955. s. 204, 205.
- 10) POTOČNÁK I.: Chemické výpočty vo všeobecnej a anorganickej chémii (skriptum). Košice: Prírodovedecká fakulta UPJŠ, 2006. s. 31.

Dynamické modelovanie na počítači

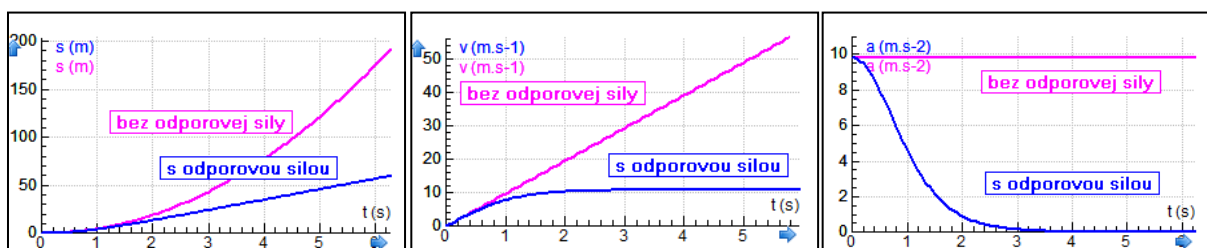
Feková Veronika

nikafek@gmail.com

Táto práca je zameraná na využitie metódy dynamického modelovania na počítači vo vyučovaní fyziky na strednej škole. V teoretickej časti práca podáva prehľad o matematickom modelovaní na počítači s využitím pri statickom, resp. dynamickom modelovaní. Pomocou metódy statického modelovania počítač s príslušným programom pomáha vypočítať a graficky zobrazit' priebeh sledovaného javu. Jednou z najväčších výhod je možnosť simulácie modelu pre rozličné hodnoty vstupných parametrov. Metóda dynamického modelovania, ktorej podstatou je numerické riešenie diferenciálnej rovnice, naproti tomu pomáha riešiť situácie, ktorých analytické riešenie nemusí byť známe. V takej pozícii sa môže nachádzať žiak strednej školy, ktorý takto dostáva do rúk nástroj, ktorý mu umožňuje vyšetrovať situácie, ktorých analytické riešenie by bez znalosti vyššieho matematického aparátu nezvládol.

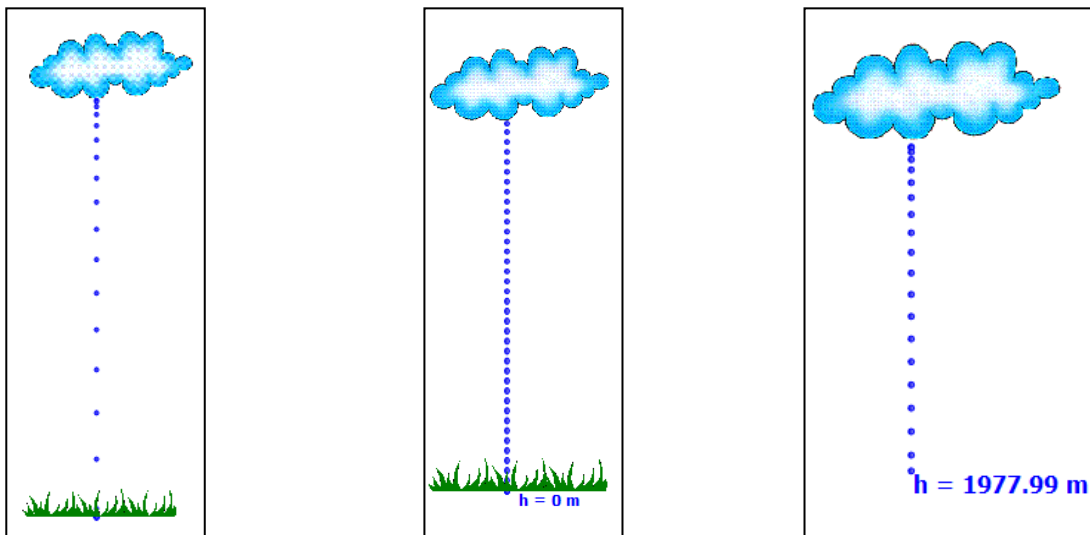
V praktickej časti práce sú predstavené dva konkrétne príklady ako metódu dynamického modelovania využiť na strednej škole v štandardnej výučbe, resp. pri vzdelávaní žiakov so zvýšeným záujmom o fyziku.

V štandardnej výučbe fyziky je možné pri výučbe pohybov žiakom zadať úlohovú situáciu pádu dažďovej kvapky na zem a určenie jej rýchlosti pri dopade na zem. Úlohou žiakov je vytvorením matematického modelu tohto javu, ktorý by čo najlepšie odpovedal skutočnosti nájsť odpoveď na zadanú otázku. Žiaci pritom postupujú od najjednoduchšieho modelu, kedy považujú pohyb kvapky za voľný pád, matematický model ktorého dobre poznajú v podobe analytických rovníc. Úlohu však môžu riešiť aj dynamickým modelovaním. Práve na tomto príklade získavajú základné zručnosti s tvorbou dynamických modelov a podľa vynesných grafických závislostí si môžu ihneď overiť správnosť svojho postupu. Na základe výsledku pre rýchlosť dopadu kvapky žiaci by mali dôjsť k záveru, že model treba upraviť smerom k uváženiu ďalšej sily, ktorá na kvapku počas jej pádu pôsobí.



Obr. 1 Závislosť dráhy, rýchlosti a zrýchlenia kvapky od času bez a za pôsobenia odporovej sily

K úlohe je pre žiakov zostavený pracovný list, zostavený so zaradením prvkov aktívneho bádania. Pre učiteľa je pripravený podrobný metodický postup, ktorým môže učiteľ postupovať vo vyučovaní spolu s vytvoreným modelom a vzorovými výsledkami. Model je doplnený o animáciu pohybu kvapky, ktorá funguje na základe matematického modelu. Nami navrhnutá vyučovacia hodina bola odskúšaná vo vyučovaní v dvoch triedach gymnázia.



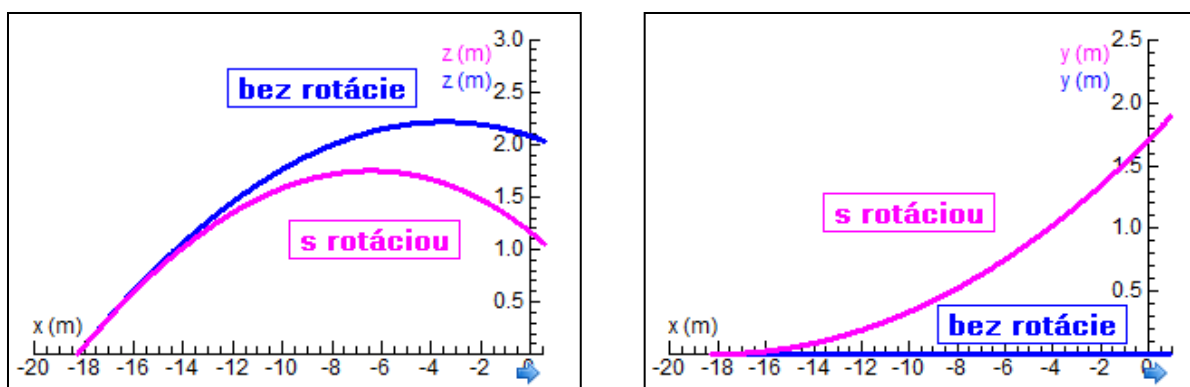
Obr. 2 Animácia voľného pádu kvapky

a) Pohľad na celý pád

b) Priblíženie prvých metrov pádu

Obr.3 Animácia pádu kvapky so započítaním odporovej sily

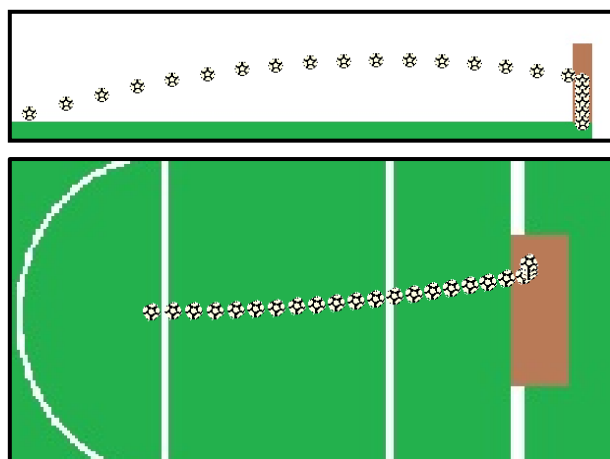
Pri rozšírenej výučbe fyziky je možné pri výučbe pohybov využiť atraktívne športové situácie, ako napr. futbal, resp. priamy kop na bránu, kedy hráč môže loptu kopnúť „za roh“. Úlohou žiakov je nájsť odpoveď na otázku ako je to možné. Pri podrobnej analýze pohybu lopty, resp. síl, ktoré na loptu počas pohybu pôsobia (gravitačná, odporová a v prípade rotácie lopty tzv. Magnusova sila) je možné na základe známych vstupných parametrov lopty (priemer, hmotnosť, vzdialenosť od brány, uhol výkopu, veľkosť a smer uhlovej rýchlosti rotácie) určiť metódou dynamického modelovania v každom okamihu jej zrýchlenie, rýchlosť, resp. polohu. Následne je možné výsledky zobrazit' graficky. Simuláciou modelu pre rozličné parametre model spolu s pripravenou animáciou prezentuje, ako sa mení výška pohybu lopty nad ihriskom, resp. zakrivenie trajektórie jej pohybu. Úlohu je možné využiť pri projektovej práci žiakov, resp. v rámci seminárov alebo krúžkovej činnosti žiakov.



a) Závislosť výšky lopty od vzdialenosti od bránky

b) Závislosť odklonu lopty od priameho smeru od vzdialenosti od bránky

Obr.4 Grafické závislosti modelu pokutového kopu s futbalovou loptou pre $f_o = 7\text{s}^{-1}$, $v_0 = 25\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, uhol výkopu 16° a odklon osi rotácie, ktorá leží v rovine yz od vertikálneho smeru o 30° .



Obr.5 Animácia modelu pokutového kopu s futbalovou loptou pre $f_o = 7\text{s}^{-1}$, $v_0 = 25\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, uhol výkopu 16° a odklon osi rotácie, ktorá leží v rovine yz od vertikálneho smeru o 30° .

References:

ETKINA, E., WARREN, A., GENTILE, M. 2006. The role of models in physics instruction. In *The physics Teacher*, January 2006, vol. 44, p.34-39

FEYNMAN, R., P., LEIGHTON, R., B., SANDS, M. 1980. Feynmanove prednášky z fyziky 1, 1.vydanie, Bratislava: vydavateľstvo Alfa Bratislava, 1980

HESTENES, D. 1987. Toward a modeling theory of physics instruction. In *American Journal of Physics*, May 1987, vol.55, no.5, p.440-454.

SPATHOPOULOS, V., M. 2009. A Spreadsheet Model for Soccer Ball Flight Mechanics Simulation, *Computer Applications in Engineering Education*, September 2011, Vol.19, Issue 3, p.508-513

Comparison of laboratory, virtual and remote experiments illustrated on photoelectric effect in framework of Nickerson's theory

Ján Zrník

Department of Physics, Faculty of Education, University of Trnava, Priemysel'ná 4,
918 43 Trnava, Slovak Republic

janzrnik@gmail.com

The objective of this project is comparison of **computer oriented experiments, laboratory, virtual and remote experiments, presented on the example of Photoelectric effect**. The layout of the work is following. First, we give the Photoelectric effect review, followed by its theoretical background. Then, we describe hands-on, virtual and remote experiment from the student's user point of view and focus on the accessibility of data and ways of their analyzing and also discuss the possible disturbances during the data collecting and processing.

Pedagogical research of this work is set to prove/disprove the hypothesis regarding the effectiveness of various forms of computer oriented experiments in the light of the Nickerson's framework and the overall results are discussed according to the Nickerson's classification 2).

The main aim of the work is to contribute to the new strategy of education – Integrated e-Learning (INTe-L) 1) based on computer oriented experimentation.



Fig. 1 The layout of the laboratory experiment Photoelectric effect (with permission of Tomas Bata university in Zlin)

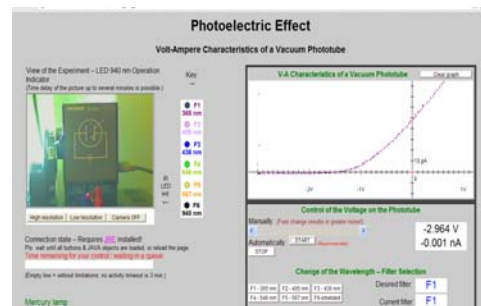


Fig. 2 The layout of the www page of the remote experiment Photoelectric effect (with a kind permission of Faculty of Math. and Physics, Charles University in Prague (see <http://kdt-29.kralov.mff.cuni.cz>))

References:

- 1) SCHAUER, F., OŽVOLDOVÁ, M., LUSTIG, F. Integrated e-Learning – new strategy of the cognition of real world in teaching physics. In *Innovation 2009, iNEER Special Volume*. 2009 (USA). ISBN 978-0-9741252-9-9, s. 119–135.
- 2) NICKERSON, J., ESCHE, S., CHASSAPIS, C. 2007. Constructing Reality: A Study of Remote, Hands-On, and Simulated Laboratory. In *ACM Tran. on Computer-Human Interaction*. 2007, Vol. 14, No 2.

Consultant: prof.dr. F. Schauer, DrSc., Faculty of Informatics, Tomas Bata University in Zlin

Fyzika je moja kamarátka – podujatie pre žiakov základných škôl

Beniačiková Mária

Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici Fakulta prírodných vied, katedra fyziky

* maria.beniackova@gmail.com

Za posledných pár rokov prebehlo v školstve niekoľko zmien. Tie zásadné sa týkali reformy obsahu ako aj metód vyučovania. Podľa platných dokumentov, ako je napríklad Štátny vzdelávací program, by sa na hodinách fyziky malo viac experimentovať. Mnohé školy však na experimentálnu činnosť nemajú podmienky, preto vytvárajú provizórne pomôcky a robia experimenty v triedach. To, že školy naozaj nemajú dobré podmienky na experimentovanie nám potvrdil prieskum medzi žiakmi a učiteľmi základných škôl, ktorý sme realizovali dotazníkovou metódou na vzorke 208 respondentov v decembri roku 2009. Dotazník obsahoval niekoľko otvorených aj uzavretých otázok týkajúcich sa používania učebníc a didaktických pomôcok, záujmu o fyziku a experimentovania na hodinách fyziky a v domácom prostredí. Analýzou dotazníkov sme dospeli k týmto záverom:



- žiaci majú radi fyziku, pričom obľúbenosť tohto predmetu priamo súvisí s učiteľom,
- žiaci základných škôl sú zvedaví a radi experimentujú,
- na hodinách fyziky by žiaci uvítali ako zmenu práve viac experimentov,
- na hodinách fyziky sa robia len základné experimenty, ktoré sú uvádzané aj v učebniciach fyziky a takmer vôbec nepoužívajú experimenty s počítačovou podporou.

Uvedomujeme si, že v súčasnom systéme, nie je možné realizovať na hodinách fyziky viac experimentov najmä z hľadiska náročnosti niektorých experimentov (časovej alebo materiálnej). Problémom sú tiež financie a fakt, že aj v dnešnej dobe je mnoho škôl, ktoré nemajú laboratória, prípadne špecializované učebne na hodiny fyziky. V školách tiež nie sú dostupné potrebné pomôcky, prípadne tie čo sú, sú zastarané, alebo nefunkčné. Učitelia sú nútení vyrábať si pomôcky vlastnoručne. Ak však učiteľ nie je dostatočne šikovný, nemá možnosti a nezaujíma sa o výrobu pomôcok, potom na hodinách fyziky nemôže pomôcky používať.

Ako možné riešenie tejto situácie sme sa rozhodli na Katedre fyziky Fakulty prírodných vied Univerzity Mateja Bela zorganizovať podujatie, ktoré bude zamerané na podporu experimentálnej činnosti žiakov základných škôl. Hlavným cieľom podujatia bolo poskytnúť žiakom možnosť získať viac skúseností s experimentmi – s ich realizáciou, ale aj s prípravou samotných pomôcok. Čiastkové ciele podujatia je možné zhrnúť do niekoľkých bodov:

- získanie skúsenosti u žiakov s experimentmi, vyskúšanie si rôznych pomôcok,
- realizovanie zaujímavej formy výučby,
- vytvorenie priestoru na experimenty,
- ukazovanie zaujímavých experimentov,
- popularizovanie fyziky.

Podujatie sme sa rozhodli nazvať Fyzika je moja kamarátka, pretože žiaci by sa po absolvovaní tohto podujatia mali viac skamarátiť s fyzikou a zistiť, že je to pekná veda. Podujatie sa konalo počas dvoch dní – utorok (7.2.2012), pričom tento deň bol určený pre žiakov šiesteho a siedmeho ročníka a štvrtok (9.2.2012) ktorý bol určený pre žiakov ôsmeho a deviatego ročníka.



Obsahom podujatia boli dve časti – úvodná popularizačná prednáška, ktorej cieľom bolo žiakov motivovať a samotná experimentálna časť. Experimentálna časť prebiehala v piatich laboratóriách, v ktorých bolo maximálne dvanásť žiakov a dvaja lektori. Každé laboratórium bolo nazvané podľa toho, aké experimenty sa v danom laboratóriu robili. Žiaci prechádzali jednotlivými laboratóriami v skupinkách,

pričom v jednom laboratóriu boli približne 25 minút. Prvé laboratórium na ceste za experimentmi bolo *Čarovanie s fyzikou*. V tomto laboratóriu sa žiaci mohli dozvedieť fyzikálny princíp niektorých kúziel, ktoré používajú mágovia, prípadne si ich sami vyskúšať – napríklad levitovanie, zmiznutie pohára, stroj na rozmnoženie mincí, Herónova guľa, atď.. Pri experimentoch bolo zdôrazňované, že fyzika nás sprevádza celým našim životom na každom kroku. Rovnaké experimenty boli použité pre žiakov všetkých ročníkov, rozličná bola len úroveň vysvetľovania.

Ďalšou zastávkou v experimentovaní bolo laboratórium s názvom *Fyzikálna hračka*, kde sme žiakom predstavili fyzikálne hračky, ktoré boli vyrobené študentmi fyziky. Okrem toho, že sa žiaci mohli pohrať so zaujímavými hračkami, mohli sa dozvedieť, že každá hračka demonštruje istý fyzikálny jav. Do tohto laboratória sme pripravili aj rôzne hry a súťaže, vďaka ktorým si žiaci mohli overiť svoje vedomosti z fyziky šiesteho ročníka.

Po zahraní sa s fyzikálnymi hračkami mali žiaci možnosť vyrobiť si jednoduchú pomôcku na fyziku v laboratóriu *Vyrobím si pomôcku*. Žiaci mali na stoloch pripravené materiály, ktoré môžu ľahko nájsť v každej domácnosti. Pomôcky, ktoré si žiaci vyrobili

mohli použiť na hodinách fyziky. Na programe bola výroba lupy z plastového obalu liekov (tabletiiek) a vody, camery obscury z kelímku od jogurtu, posúvajúcej sa lienky z kartónu, slamky a špagátu, spektroskopu z kúska cd nosiča. Každá z týchto pomôcok bola použitá počas podujatia a žiakom bol vysvetlený princíp jej fungovania.

Laboratórium optiky malo názov *Optika mojimi očami*. Tu mali žiaci možnosť vidieť, ako sa miešajú farby, aké zrkadlá existujú, ako prebieha vyšetrenie u očného lekára a tiež princíp fungovania optického vlákna. Napriek tomu, že mladší žiaci ešte optiku nemali, tieto experimenty boli zaradené aj pre žiakov šiesteho a siedmeho ročníka s cieľom motivovania žiakov na túto tému. Samozrejme pre tieto ročníky bolo potrebné prispôbiť úroveň vysvetľovania daných javov.

Poslednou zastávkou v skamarátení sa s fyzikou bolo laboratórium *Experimentáreň*. V tomto laboratóriu boli experimenty zamerané na jednotlivé ročníky, to znamená, že neboli rovnaké počas oboch dní a súviseli s učivom preberaným v jednotlivých ročníkoch. Zaradené boli experimenty s pomôckami ako napríklad vákuový zvon, ktorý v školách nemajú a je možné pomocou neho veľmi pekne demonštrovať niektoré javy (napr. teplota varu vody pri zníženom tlaku). Do tohto laboratória sme tiež zaradili počítačom podporované experimenty, s ktorými majú žiaci málo skúseností.



Do celého podujatia boli zapojení študenti učiteľstva fyziky ako lektori v jednotlivých laboratóriách. Počas prvého dňa (utorok 7.2.2012) sme na podujatí privítali 53 žiakov v sprievode 3 učiteľov z troch základných škôl z Banskej Bystrice. Celé podujatie začalo o deviatej hodine uvítaním v prednáškovej miestnosti. Žiaci sa po privítaní rozdelili do piatich skupín, ktoré v sprievode lektorov odišli do jednotlivých laboratórií na výpravu za experimentmi. Po uplynutí 25 minút sa v sprievode jedného z lektorov presunuli do ďalšieho laboratória, pričom druhý lektor počkal druhú skupinku v laboratóriu. Keď už sa v každom laboratóriu vystriedalo 5 skupín, všetci sme sa zišli v prednáškovej miestnosti, aby sme si spolu so žiakmi vypočuli zaujímavú prednášku na tému *Oblaky naše každodenné* pod vedením dr. Martina Hrušku. Po prednáške bol priestor na diskusiu. Aby sme získali spätnú väzbu od žiakov a zistili, či sa im podujatie páčilo a čo je potrebné zlepšiť, požiadali sme

žiakov o vyplnenie dotazníkov. Rovnako nás zaujímal názor učiteľov, pre ktorých sme takisto pripravili dotazníky. Približne o dvanástej hodine sme sa so žiakmi rozlúčili.

Vo štvrtok 9.2.2012 naše podujatie navštívilo 56 žiakov v sprievode troch vyučujúcich opäť z troch základných škôl v Banskej Bystrici. Tentokrát po úvodnom privítaní nasledovala prednáška Mgr. Mareka Balážoviča, ktorý žiakom prednášal o Mpembovom jave — o jave kedy teplá voda zamrzne skôr ako studená. Samozrejme, pred žiakmi urobil aj dôkaz pomocou experimentu. Po prednáške sa opäť žiaci rozdelili do piatich skupín. Ako sme už spomenuli, štvrtkové podujatie bolo určené pre starších žiakov základných škôl, no napriek tomu boli medzi ôsmakmi a deviatakmi aj šiestaci. Vysvetľovanie princípu experimentov bolo teda prispôsobené aj týmto žiakom. Žiaci opäť prechádzali jednotlivými laboratóriami. O dvanástej hodine sme sa po získaní spätnej väzby od žiakov a učiteľov so žiakmi rozlúčili.

Pre zaujímavosť nižšie uvádzame z dotazníkov tabuľku hodnotení jednotlivých laboratórií žiakmi (hodnotenie známkami ako v škole).

Tabuľka *Hodnotenie jednotlivých laboratórií*

laboratórium	Utorok 7.2.2012	Štvrtok 9.2.2012	Priemer
Čarovanie s fyzikou	1,44	1,25	1,35
Optika mojimi očami	1,65	1,81	1,73
Fyzikálna hračka	1,63	1,38	1,51
Vyrobím si pomôcku	1,58	1,64	1,61
Experimentáreň	1,61	1,43	1,52

Na základe dotazníkov sme zistili, že žiakom sa podujatie **Fyzika je moja kamarátka** páčilo. Preto je našim cieľom do budúcnosti, aby sme podujatie opakovali v pravidelných intervaloch, aby sa podujatia mohlo zúčastniť čo najviac žiakov základných škôl. V súčasnosti je málo základných škôl, ktoré by mali dobré podmienky a možnosti na experimentovanie na hodinách fyziky. Naším podujatím by sme tak žiakom a školám mohli pomôcť pri zlepšení tejto situácie. Vysoké školy väčšinou upriamujú svoju pozornosť na žiakov stredných škôl, pričom takýmto spôsobom majú možnosť získať budúcich študentov. Ak však upriamime našu pozornosť na mladších žiakov, môžeme si tiež vychovať budúcich študentov. Ak budeme pestovať vzťah k fyzike už v mladšom veku, je veľká šanca, že tento vzťah bude trvalejší a pevnejší. Vďaka spätnej väzby od žiakov môžeme naše podujatie stále zlepšovať a vytvoriť tak podujatie, ktoré bude dopĺňať učivo základných škôl, ktoré žiakom ukáže, že fyzika je všade okolo nás a že súvisí s každodenným životom a skutočne môže byť a aj je našou kamarátkou.

Miskoncepce žáků a studentů při interpretaci kinematických grafů

Trulíková Blanka*

KDF MFF UK v Praze

* blanka.trulikova@seznam.cz

Předkládaný abstrakt se zabývá výzkumem realizovaným v rámci řešení bakalářské práce týkající se tématu miskoncepce žáků a studentů při interpretaci kinematických grafů.

Úvod

S rozvojem technologií a počítačů se zobrazení dat pomocí grafů a jejich následná interpretace stala běžnou součástí našich životů. Výhody, které tato forma reprezentace nějakého jevu přináší vědcům zmiňuje např. [1], [2]. Na základě výše uvedeného je vcelku zřejmé, že práce s grafy má také své místo ve výuce fyziky. Zde se žáci často setkávají s grafy poprvé v rámci tématu kinematika, kde se věnují dvěma základním typům úloh: interpretaci (odečítání údajů z) předloženého grafu anebo vytváření/konstrukci grafů. Interpretace daného grafu je zřejmě komplexní dovednost, jejíž osvojení může být velmi užitečné pro širokou populaci i v běžném životě. Proto bylo výzkumné téma bakalářské práce zúženo na interpretaci kinematických grafů.

Obr. 1

Tab. 2.1: Rozdělení úloh podle dovedností potřebných při jejich řešení

	Bylo zadáno – závislost veličin v daném grafu	Sledovaná dovednost	Číslo úlohy		
1	souřadnice polohy, čas	určení rychlosti	5	13	17
2	rychlost, čas	určení zrychlení	2	6	7
3	rychlost, čas	určení dráhy	4	18	20
4	zrychlení, čas	určení změny rychlosti	1	10	16
5	pohybový graf ¹	k danému grafu nalézt odpovídající graf jiné závislosti	11	14	15
6	pohybový graf ²	slovní popis jevu reprezentovaného grafem	3	8	21
7	slovní popis pohybu	k danému grafu nalézt odpovídající graf jiné závislosti	9	12	19

¹ Jednalo se o závislosti souřadnice polohového vektoru na čase, rychlosti na čase a zrychlení na čase (viz zadávaný test v Příloze I)

² Jednalo se o závislosti dráhy na čase, souřadnice polohového vektoru na čase a rychlosti na čase (viz zadávaný test v Příloze I)

Cíle a metodika výzkumu

Cílem realizovaného výzkumu bylo zjištění typických chybných představ žáků při již zmíněné interpretaci kinematických grafů. K tomu byl použit v Americe standardizovaný test „Test of Understanding Graphs in Kinematics“ (TUG-K) vytvořený Robertem J. Beichnerem

z North Carolina State University. Použitý nástroj již zmiňuje metodu popisovaného výzkumu: Zjišťování miskoncepcí bylo provedeno pomocí testu. Součástí řešení bakalářské práce byl tedy v první řadě překlad tohoto testu a jeho případná mírná modifikace vzhledem ke školské terminologii v ČR. Jedná se o konceptuální test složený z 21 testových položek týkajících se kinematiky. Úlohy testu jsou uzavřené s právě jednou správnou odpovědí z 5 alternativ. Pomocí TUG-K testu jsou zkoumány dovednosti uvedené v rámci obr. 1. Ten zobrazuje, jak jsou jednotlivé úlohy testu rozděleny podle dovedností potřebných k jejich úspěšnému vyřešení. Tabulka na obr. 1 je převzata z [1]. Test byl zadán jak studentům středních, tak vysokých škol na začátku roku 2010. V případě středních škol se

jednalo celkem o 171 žáků ze 4 pražských gymnázií. V případě vysokých škol byli osloveni pouze studenti MFF UK v Praze. Celkem se testování zúčastnilo 41 vysokoškolských studentů z oborů fyzika, matematika, informatika a učitelství fyziky-matematiky.

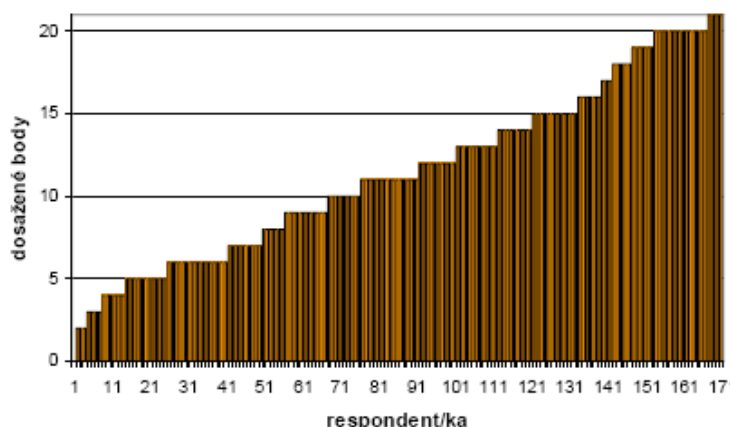
Výsledky

Celková získaná skóre jednotlivých testovaných žáků uvádí pro žáky středních škol obr. 2. V grafu pro VŠ studenty skóre začíná na vyšší hodnotě a jeho nárůst je celkově pozvolnější, než jak je tomu v případě žáků středních škol. U obou skupin je při makroskopickém pohledu obalová křivka grafů celkem hladká. Z toho vyplývá, že v tomto testu nebylo zaznamenáno žádné skóre, kterého by žáci a studenti dosahovali výrazně častěji.

V rámci analýzy jednotlivých testových úloh byla zjištěna četnost výběru jednotlivých alternativ, byla spočítána obtížnost úloh a dále graficky posouzena jejich citlivost. Výběr jednotlivých alternativ žáky středních škol pro všechny úlohy zachycuje obr. 3. Číslo 9 značí respondenty, kteří danou úlohu neřešili. Obr. 4 ukazuje stejná data pro studenty MFF UK. Z grafů je patrné, že u jednotlivých otázek nejsou v odpovědích zastoupeny všechny

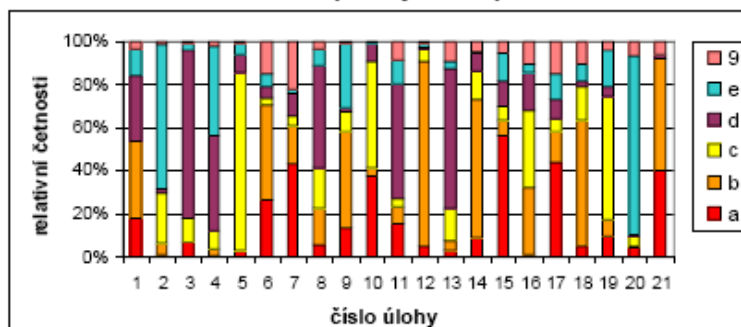
Obr. 2

Graf 3.1: Celková získaná skóre jednotlivých respondentů SŠ



Obr. 3

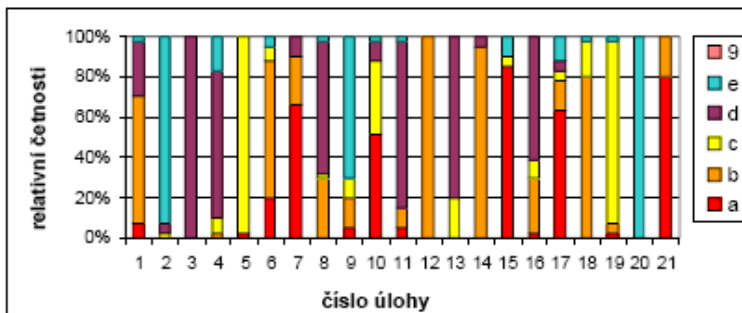
Graf 3.13: Relativní četnosti výběrů jednotlivých alternativ - SŠ



alternativ. Obr. 4 ukazuje stejná data pro studenty MFF UK. Z grafů je patrné, že u jednotlivých otázek nejsou v odpovědích zastoupeny všechny

Obr. 4

Graf 3.14: Relativní četnosti výběrů jednotlivých alternativ - VŠ



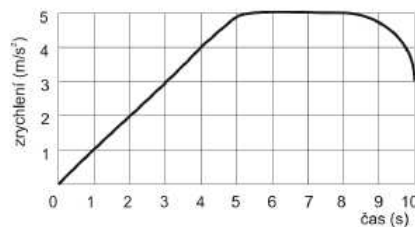
alternativy, což znamená, že některé distraktory nemají zřejmě v úlohách smysl – žáci a studenti je nevolí. Tyto výsledky mohou sloužit jako podklady k následné kritické diskuzi testu.

Celková obtížnost jednotlivých úloh se pohybovala u žáků středních škol v rozmezí 15 - 85 %, pro studenty MFF UK byl test celkově lehčí (obtížnost v rozmezí 0 až 49 %). Nejobtížnější úlohou pro žáky středních škol byla úloha č. 16 (viz obr. 5), správnou odpověď uvedlo necelých 20 % žáků.

Pro žáky středních škol byla většina úloh citlivých (např. úloha č. 18 uvedená na obr. 6). Pro studenty MFF UK

Obr. 5 Úloha č. 16

16 Těleso se pohybuje se zrychlením, jehož časovou závislost ukazuje graf níže:



Změna rychlosti tělesa během prvních tří sekund pohybu byla:

- a) 0,66 m/s b) 1,0 m/s c) 3,0 m/s d) 4,5 m/s e) 9,8 m

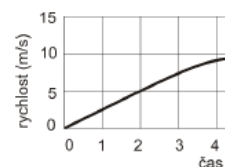
byla třetina úloh necitlivá.

Pro vzorek respondentů testovaný R. J. Beichnerem nebyla na rozdíl od vzorku mého vlastního výzkumu žádná úloha velmi lehká, za obtížné lze označit dvě. Celkově byl test pro pražské studenty a žáky snazší než pro vzorek studentů testovaný autorem testu. Co se týče volby distraktorů, výsledky, které přinesl výzkum skupiny SŠ žáků, jsou ve velké shodě s těmi, které zjistil při testování R. J. Beichner. Oba vzorky respondentů ve většině úloh nejčastěji volily tytéž distraktory, jediné patrnější rozdíly mezi výsledky úloh jsou u 2 z 21 úloh testu.

Obr. 6 Úloha č. 18

18 Kdybyste chtěli zjistit dráhu, kterou těleso urazilo během časového intervalu od $t = 0$ s do $t = 2$ s, z grafu vpravo byste:

- přímo odečetli hodnotu 5 na svislé ose
- zjistili obsah plochy mezi odpovídající částí křivky grafu a časovou osou výpočtem $(5 \cdot 2)/2$
- zjistili směrnici příslušné části křivky grafu výpočtem $5/2$
- zjistili směrnici příslušné části křivky grafu výpočtem $15/2$
- neměli dostatek informací k vyřešení úlohy



Různým chybám, jichž se respondenti v testu dopouštěli, lze s využitím tabulky 2.1 (viz obr. 1) přiřadit dovednost, kterou testovaný jedinec patrně neovládá, jestliže úlohu řešil nesprávně.

Na základě tohoto posouzení úloh a výsledků viz výše byly vytipovány miskoncepce respondentů. Následně je uveden stručný přehled pěti špatných či chybějících představ:

- Představa, že graf je náčrtem reálné situace, graf jako „obrázek“
- Představa, že změnou proměnných grafu se tvar křivky nemění
- Vzájemná záměna grafů závislosti souřadnice a rychlosti na čase
- Nepochopení významu obsahu plochy pod grafem
- Nepochopení významu směrnice grafu v daném bodě

Podobné miskoncepce byly identifikovány na základě výsledků výzkumů např. v [1], [3], [4]. Zejména první ze zmíněných představ vede žáky velmi často k nesprávnému řešení úloh z kinematiky, kdy vnímají křivku v grafu závislosti kinematických veličin na čase jako trajektorii pohybujícího se objektu.

Závěr

Jelikož standardizace testu byla provedena v Americe, je možné, že spolehlivost tohoto testu může být v podmínkách v ČR jiná. Výsledky prezentovaného výzkumu tedy musí být interpretovány jako výstupy pilotního šetření. V rámci položkové analýzy se ukázala poměrně dobrá citlivost jednotlivých úloh pro žáky středních škol. Pro studenty MFF UK je test příliš lehký a necitlivý. V rámci bakalářské práce bylo provedeno kritické posouzení testu a navržena změna uvedeného testu tak, aby jeho použití pro výzkumné účely bylo efektivnější.

Literatura:

- 1) Beichner, R.: *Testing student interpretation of kinematics graphs*, Am. J. Phys. 62 (8), 750-762 (1994)
- 2) McDermott, L.C., Rosenquist, M. L., van Zee, E. H.: *Students difficulties in connecting graphs and physics: Examples from kinematic*, Am. J. Phys. 55 (6), 503-513 (1987)
- 3) Ješková, Z.: *Testovanie schopností Žižkov interpretovať grafy kinematických funkcií (závislostí)*, Obzory matematiky, fyziky a informatiky, 3, 44-55 (2000)
- 4) Gřondilová, M.: *Práce s grafy ve výuce fyziky*, Diplomová práce, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Praha (2004)

MASTERCLASSES ALICE – ANALÝZA CVIČENIA

Krišková Katarína

Katedra fyziky, FPV Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici

katarina.kri@gmail.com

Cvičenie Masterclasses ALICE sa realizuje počas medzinárodného podujatia International Masterclasses Hands on Particle Physics určeného pre žiakov stredných škôl. Obsahom cvičenia je hľadanie podivných častíc medzi produktmi zrážok dvoch protónov na LHC a zistenie ich počtu. Meranie podivných častíc je dôležité pri posudzovaní existencie a vlastností kvarkovo - gluónovej plazmy, ktorá vzniká v kolíziách ťažkých jadier. Protón-protónové zrážky, ktoré sú v cvičení poskytnuté žiakom, slúžia ako referenčné údaje, s ktorými sa produkcia podivnosti v jadrových zrážkach porovnáva.

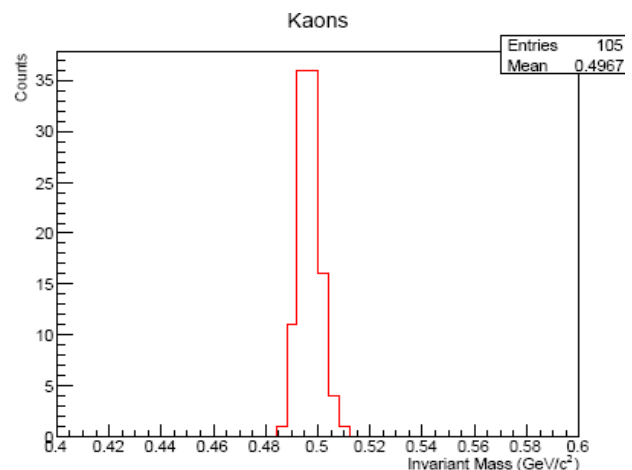
Náplňou daného cvičenia je hľadanie V0 častíc, presnejšie $K_s^0, \Lambda^0, \bar{\Lambda}^0$. Tieto častice nie sú v detektore pozorovateľné. Rozpadajú sa na nabité častice, ktoré je detektor schopný zaregistrovať. Zo zmeraných hodnôt hybností a energie produktov rozpadu je možné vypočítať hmotnosť pôvodnej častice. Dané častice pozorujeme prostredníctvom týchto rozpadových kanálov:

$$K_s^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$$

$$\Lambda^0 \rightarrow p \pi^-$$

$$\bar{\Lambda}^0 \rightarrow p^- \pi^+$$

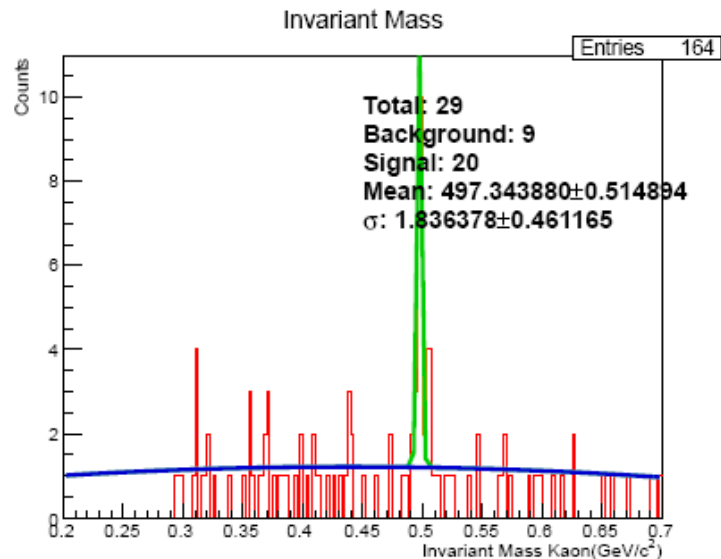
Na to, aby sme pri analýze potvrdili, či sa jedná o danú časticu, overíme jej hmotnosť. Hmotnosť častice vypočítame z hodnôt energie a zložiek hybnosti produktov rozpadu. Z vypočítaných hmotností zostavíme histogram hmotností určených z rôznych párov. Pri analýze sa stretne aj s párami častíc, ktoré nemusia pochádzať z rozpadu a sú náhodné. Preto počítame hmotnosť pre každý pár. Pre hodnoty hmotnosti rozpadajúcej sa častice budeme pozorovať viac párov ako z kombinatorického pozadia. Dané zvýšenie počtu sa prejaví píkom v histograme. Obsah tohto píku udáva počet rozpadajúcich sa častíc.



Obrázok 1 Histogram invariantnej hmotnosti párov π^+, π^-

Analýza zrážok prebieha v prostredí ROOT za pomoci prostriedku „ALICE event display“. Existujú dve verzie programu. Základná verzia sa zameriava na manuálne hľadanie a analýzu zrážok. V rozšírenej verzii sa analyzuje väčší počet zrážok. Táto verzia je zameraná na výber parametrov pre vyhľadávanie a následnú automatickú analýzu 2000 zrážok.

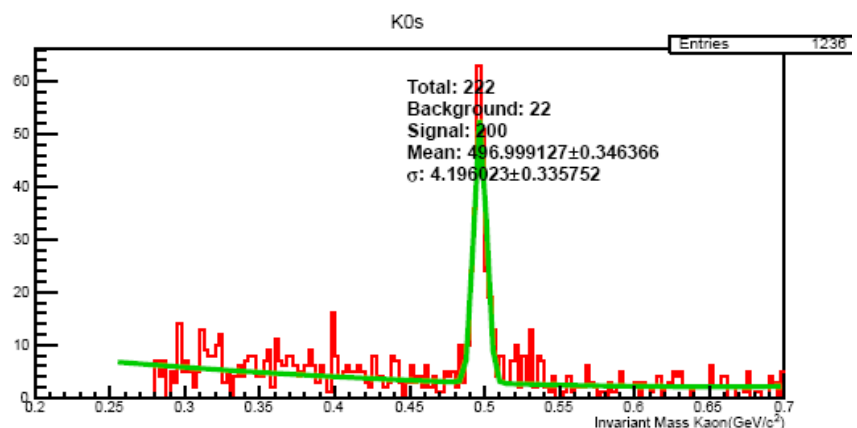
V základnej verzii sme analyzovali zrážky manuálne. Každá sada obsahuje 30 zrážok, čo v skutočnosti zodpovedá 1400 zrážkam. Analyzovali sme 6 sád údajov. Po analýze dátovej sady sme získali histogram invariantnej hmotnosti párov častíc, na ktoré sa hľadaná častica rozpadla. Následne sme získané histogramy príslušnej častice spojili, a tým sme získali histogram, ktorý je z hľadiska interpretácie výsledkov presnejší, nakoľko obsahuje viac dát (Obrázok 1). Štatistická neistota je daná ako \sqrt{N} . Preto je relatívna neistota nameraných početností pomerne veľká.



Obrázok 2 Histogram invariantnej hmotnosti párov π^+ , π^- s fitovaním

V rozšírenej verzii sme analyzovali väčší počet zrážok (2000 pre každú dátovú sadu). Histogram, ktorý sme získali, sme fitovali. Pozadie je fitované polynómom tretieho stupňa a signál je fitovaný Gaussovou krivkou. Na základe fitovania vieme zistiť počet častíc daného typu. Počet pozorovaných častíc je plocha píku bez pozadia.

Výsledky sme získali vo forme histogramu invariantnej hmotnosti. Obrázok 2 zobrazuje histogram invariantnej hmotnosti párov π^+ , π^- , ktorý sme získali po analýze 2000 zrážok. V danom

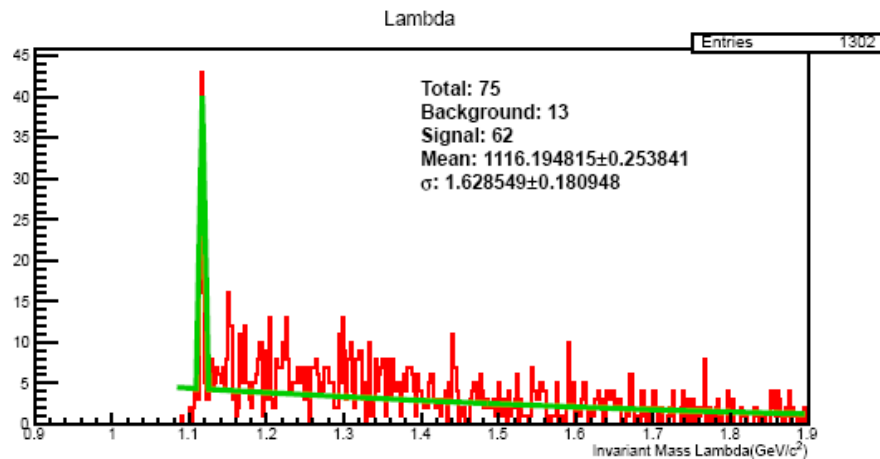


Obrázok 3 Histogram invariantnej hmotnosti párov π^+ , π^-

obrázku je zobrazená aj fitovacia krivka. Modrou farbou je zobrazené fitovanie pozadia. Vrchol je fitovaný krivkou zafarbenou nazeleno.

Z informácií, ktoré sme po fitovaní získali, môžeme vyčítať počet častíc K_s^0 , ktoré vznikli po zrážke. Tento počet je označený ako „Signal“. V histograme je pozadie potlačené, lebo sa pozeráme len na prípady so sekundárnym vertexom. Z informácií môžeme vyčítať aj hmotnosť častice K_s^0 . Táto je označená ako stredná hodnota danej zelenej krivky. Číslo σ udáva šírku Gaussovej krivky, ktorá je spôsobená predovšetkým neistotami merania.

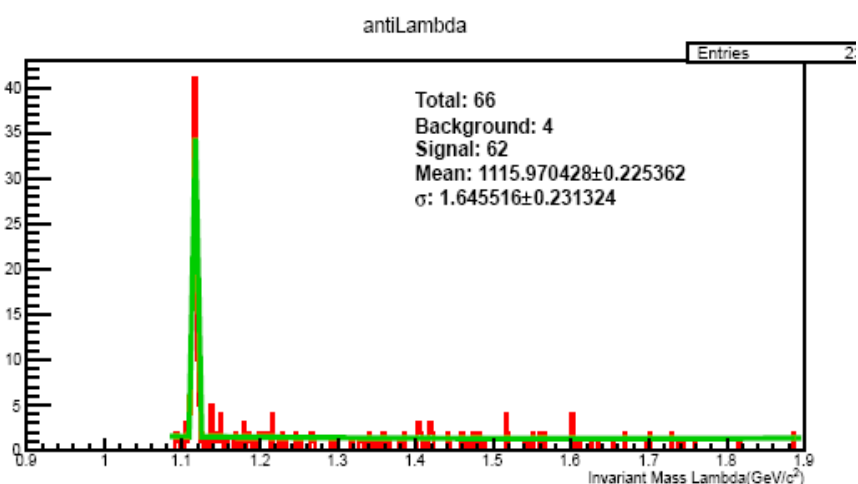
Po analýze 6 prístupných dátových sád sme získané výsledky spojili. Tým sme zväčšili štatistický súbor a preto sú výsledky presnejšie. Obrázok 3 ukazuje histogram párov π^+, π^- . Obrázky 4, 5 zobrazujú analogické histogramy pre rozpad častíc Λ^0 a $\bar{\Lambda}^0$.



Obrázok 4 Histogram invariantnej hmotnosti párov p, π^-

V rozšírenej verzii sme vyskúšali aj hľadanie častice ϕ mezón. Hľadanie danej častice nie je štandardne súčasťou cvičenia Masterclasses ALICE.

Z hľadiska fyziky je ϕ mezón veľmi zaujímavý, nakoľko sa skladá predovšetkým z kvarkov $s\bar{s}$. Navonok nie je podivný (jeho podivnosť je 0), ale jeho podivnosť je skrytá. Preto je jeho meranie cenné. Túto časticu môžeme pozorovať pomocou rozpadu na mezóny $K^+ K^-$. Zadaním produktov rozpadu ako vstupných parametrov sme analyzovali súbory dát, ktoré obsahovali po 2000 udalostí. Spojením všetkých údajov sme získali histogram invariantnej hmotnosti párov $K^+ K^-$ (Obrázok

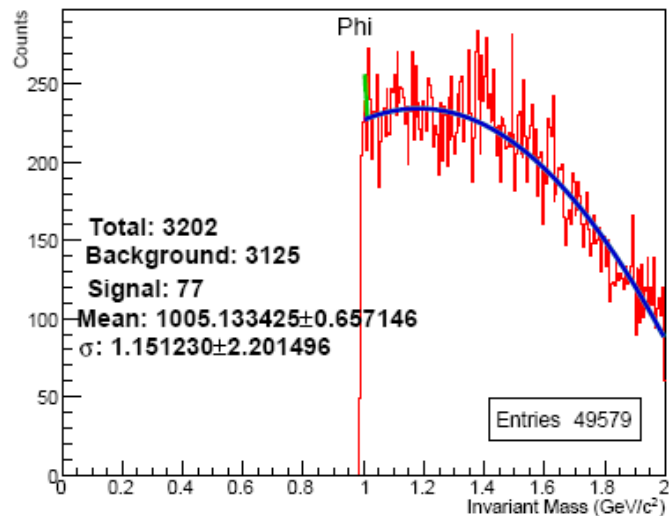


Obrázok 5 Histogram invariantnej hmotnosti párov p^-, π^+

6). Mezón ϕ sa rozpadá rýchlo a pozadie sa tu nedá potlačiť tým, že budeme vyžadovať

sekundární vertex. Preto je jeho signál v porovnaní s pozadím menej výrazný ako to bolo pri K_s^0 a Λ . Výsledok, ktorý sme získali avšak nie je štatisticky signifikantný, nakoľko pomer signálu a pozadia je veľmi malý. Ak by sme chceli, aby bol tento pomer väčší a meranie presnejšie, museli by zväčšiť počet analyzovaných dát.

Toto cvičenie, s ktorým sa v rámci podujatia Interational Masterclasses stretávajú žiaci stredných škôl, poukazuje na význam štatistiky. Porovnaním histogramov s rozdielnym počtom dát vidíme, že v súbore s väčším počtom dát sú získané výsledky presnejšie. Po analýze viacerých zrážok je pomer signálu a pozadia väčší, čo nám umožňuje lepšie odčítať signál, ktorý reprezentuje počet hľadaných častíc.



Obrázok 6 Histogram invariantnej hmotnosti párov $K^+ K^-$

References:

- 1) Looking for strange particles in ALICE [online]. Dostupné na internete :< <http://www.physicsmasterclasses.org/exercises/ALICE/MasterClassWebpage.html>>.
- 2) P. Bartoš: Úvod do fyziky ultrarelativistických jadrových zrážok (diplomová práca). Banská Bystrica : Univerzita Mateja Bela Banská Bystrica, 2007.

The technical use of charged particles in an electric field

Michaela Rajničová

Department of Physics, Faculty of Education, Trnava University in Trnava
Slovak Republic

* rajnicovamichaela@gmail.com

The topic of the presented work is the description and modeling of the technological use of charged particles in the electric field. The work is devoted to the description of selected simulations to simulate the deflection of beam of particles, particles acceleration and manipulating of particles in the electric field. To describe simulations various mathematical methods are used that can be modeled by different simulation environments, such as, for example Flash, Easy Java Simulations (EJS), the second one we use in this work. The thesis deals with three simulations in EJS - **Particles flight in the electric field** (Fig.1) **Cyclotron** and **Simulation of levitation and oscillation of charged particles**(Fig.2). In technology the deflection of particles are used in television tubes and particle accelerators (cyclotron), modifications in materials and for generating cyclotron radiation in medicine. Levitation of charged particles and their oscillation frequency can be used in the manipulating of particles their moving, or their controlled oscillations used in nanotechnologies (see analogue of the magnetic vessel (<http://remotelab4.truni.sk>)).

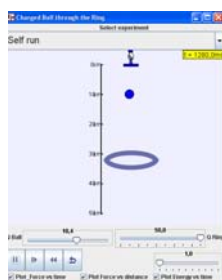


Fig. 1 Simulation of levitation and oscillation of charged particles electric field

<http://www.opensourcephysics.org/items/detail.cfm?ID=10492>

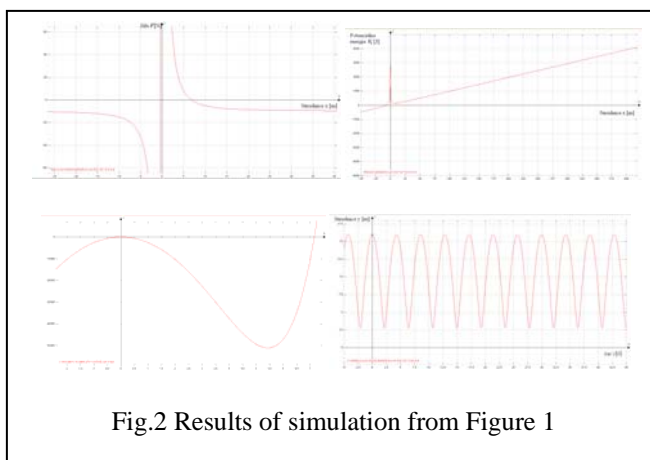


Fig.2 Results of simulation from Figure 1

The main aim of the work is to contribute to the new strategy of education – Integrated e-Learning (INTe-L) 1), based on computer oriented experimentation . The simulations used are aimed at different levels of physics education from elementary school (Particles flight) to secondary schools (Cyclotron) and to universities (Levitation). The theoretical justification of the simulations is given in the framework o kinetics, dynamics and energy conservation.

References:

1) SCHAUER, F., OŽVOLDOVÁ, M., LUSTIG, F. Integrated e-Learning – new strategy of the cognition of real world in teaching physics. In *Innovation 2009, iNEER Special Volume*. 2009, (USA), p. 119 –135

Consultant: prof.dr. F. Schauer, DrSc., Faculty of Informatics, Tomas Bata University in Zlin

NÁVRH ŠKOLSKÉHO TLAKOMERA A JEHO VYUŽITIA VO VYUČOVANÍ

Jančár_Peter^{1,*}

Školiteľ: Horváth_Peter¹

1. *Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava 4*

* peto.jancar@gmail.com

Cieľom práce je návrh školského tlakomera ako jednoduchého meracieho zariadenia využiteľného pri experimentoch podnecujúcich aktívne poznávanie v prírodovednom predmete fyzika a ukážka využitia tlakomera na príklade konkrétneho experimentu.

Motiváciou vytvorenia tlakomera je súčasná náročná cenová dostupnosť školských tlakomerov a zložitosť merania tlaku pomocou analógových tlakomerov (U-trubica, ručičkový barometer).

Základnou myšlienkou konštrukcie tlakomera je úprava výstupného napät'ového signálu tlakového senzora a zobrazenie tejto hodnoty pomocou digitálneho multimetra. V konštrukcii tlakomera používame absolútny tlakový senzor MPXA4250C6U. Tlak plynu pôsobiaci na tlakový senzor sa pomocou piezorezistívneho senzora mení na napät'ový signál. Závislosť napätia od tlaku plynu pôsobiaceho na tlakový senzor je daná vzťahom:

$$VOUT = U_S \cdot (0,004 \cdot p - 0,04) \pm Error$$

Napät'ový signál z tlakového senzora je upravovaný obvodom operačného zosilňovača LM358. Hodnota tlaku plynu zobrazovaná na displeji digitálneho multimetra pri rozsahu 2000 mV je hodnotou tlaku plynu v hPa.

Rozsah merania tlaku plynu je daný parametrami tlakového senzora. Tlakový senzor je schopný merať tlak plynu od 20 – 250 kPa. Pri nastavení rozsahu digitálneho multimetra na 2000 mV meriame tlak plynu v rozsahu od 20 hPa do 2000 hPa. Ak zmeníme rozsah digitálneho multimetra na 20 V, môžeme tlakomerom merať tlak plynu do 250 kPa. Presnosť tlakomera je, rovnako ako rozsah tlakomera, daná presnosťou tlakového senzora, pričom záleží od druhu zdroja elektromotorického napätia, ktorým obvod tlakomera napájame. Obvod tlakomera môže byť napájaný zo stabilizovaného zdroja 9 V (500 mA) napätia, alebo 9 V batériou.

Kalibrácia školského tlakomera závisí od výberu zdroja napätia. Ak používame stabilizovaný zdroj, tlakomer kalibrujeme iba prvý krát (pri výrobe). Pri použití 9 V batérie kalibrujeme tlakomer pred každým meraním na hodnotu atmosférického tlaku. Kalibráciu môžeme vzhľadom na školské použitie tlakomera urobiť podľa hodnôt tlaku vzduchu uvádzaných na

meteorologických portáloch. Uvedenú hodnotu atmosférického tlaku, redukovanú na hladinu mora, prerátame na hodnotu atmosférického tlaku vzduchu na mieste merania podľa vzťahu:

$$p = \frac{p_{red}}{1 + \frac{9,80665 \cdot h}{287 \cdot \left[273 + t + \left(\frac{h}{400}\right)\right]}}$$

Výhody školského tlakomera:

- jednoduchá konštrukcia z bežne dostupných elektronických súčiastok,
- presnosť merania hodnoty tlaku plynu pôsobiaceho na tlakový senzor,
- výborná cenová dostupnosť oproti komerčne vyrábaným tlakomerom s porovnateľnými vlastnosťami merania tlaku plynu,
- možnosť merania tlaku plynu v teréne (pri napájaní 9 V batériou),
- jednoduché zobrazovanie hodnoty tlaku plynu pomocou digitálneho multimetra.

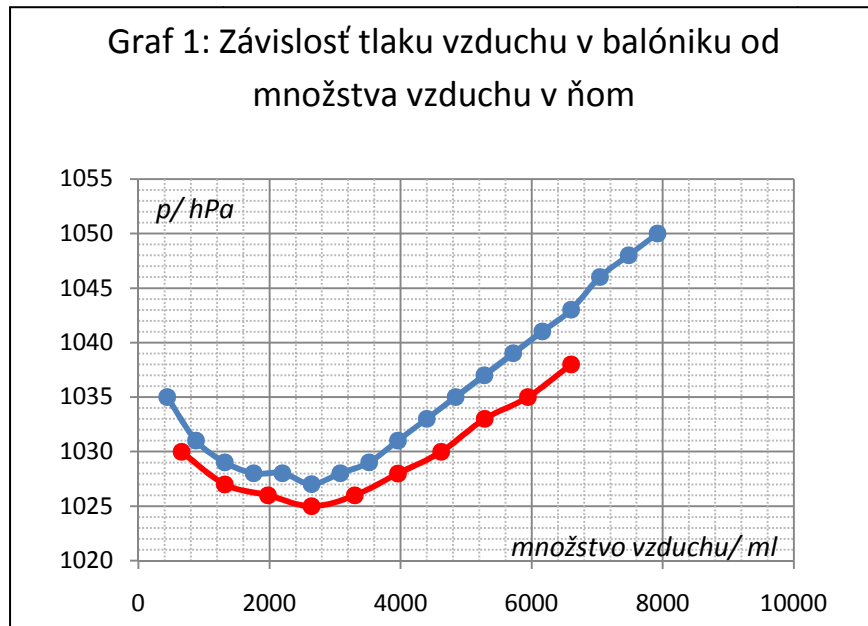
Nevýhody školského tlakomera:

- klesajúca hodnota referenčného napätia (pri napájaní 9 V batériou)

Školský tlakomer môžeme využiť na meranie tlaku plynu v experimentoch popísaných v učebniciach fyziky pre základné a stredné školy a v štátnom vzdelávacom programe. Medzi najčastejšie experimenty, pri ktorých sa tlakomer vo vyučovaní používa patrí meranie atmosférického tlaku, meranie podtlaku, demonštrácia stlačiteľnosti plynov a meranie izotermického a izochorického deja. Školský tlakomer možno využiť na meranie tlaku plynu aj pri experimentoch nezarađených v textoch učebníc.

Experiment, v ktorom môžeme využiť tlakomer na meranie tlaku plynu je napríklad: Určenie závislosti tlaku vzduchu v balóniku od množstva vzduchu v ňom. Hlavným cieľom experimentu je, aby si žiaci uvedomili, že nie všetky závislosti musia byť lineárne.

Počas hodiny, na ktorej žiaci spomínanú závislosť merajú, je vhodné, viesť ich čiastkové kroky. Na začiatku hodiny poprosíme žiakov, aby skúsili vytvoriť hypotézu, ako bude podľa nich závisieť tlak vzduchu v balóniku od množstva vzduchu v ňom. Žiaci vo svojich hypotézach najčastejšie predpovedajú lineárnu závislosť. Postupným priebehom hodiny, meraním závislosti a vykreslením nameraných hodnôt do grafu, žiaci prichádzajú na to, že ich hypotézy sa s reálnym výsledkom nezhodujú. Závislosť tlaku vzduchu v balóniku od množstva vzduchu v ňom znázorňuje graf 1. V grafe 1 je zobrazená závislosť dvoch nezávislých meraní. V prvom meraní (modrá krivka) bola hodnota tlaku vzduchu v balóniku odmeraná po každom štvrtom stlačení piestu pumpy. Druhé meranie (červená krivka) zaznamenáva hodnoty tlaku po každom šiestom stlačení. Z grafu 1 je vidieť, že tlak vzduchu v balóniku s narastajúcim objemom klesá, kým nedosiahne množstvo vzduchu pri ktorom je hodnota tlaku najmenšia. Po dosiahnutí najmenšej hodnoty tlaku hodnota tlaku vzduchu v balóniku so zväčšujúcim sa množstvom vzduchu narastá.



Počas aktivity žiaci stanovujú hypotézu, experimentálne ju overujú, interpretujú dosiahnuté výsledky merania a porovnávajú svoje hypotézy s výsledkom merania. Na záver môžu žiaci s pomocou učiteľa hľadať príčiny, prečo namerali inú ako predpokladanú závislosť. Príčiny nelineárnej závislosti môžeme analyzovať aj na základe textu uvedeného v učebných materiáloch B. Vybírala, napísaných pre potreby fyzikálnej olympiády.

Literatúra:

- 1) Katalógový list senzora tlaku – MPXA4250C6U Series
- 2) P. Jančár, Žiacke a učiteľské experimenty vo vyučovaní fyziky na SŠ : diplomová práca. Bratislava: Univerzita Komenského,34-51 (2012).
- 3) B. Vybíral, Mechanika ideálných plynů. [online]. Hradec Králové. 44-49. Dostupné na internete: < <http://fyzikalniolympiada.cz/texty/plyny.pdf>>

Využívání dataloggerů ve výuce fyziky na středoškolské úrovni

Petr Kácovský

pkacovsky@centrum.cz

Poznámka: Soutěžní práce je výňatkem z diplomové práce „Využívání dataloggerů ve výuce fyziky (se zaměřením na Vernier)“. Tento název napovídá, že k provádění experimentů byly využity senzory školního experimentálního systému Vernier.

Modernizující se vybavení škol umožňuje do experimentální výuky (nejen) fyziky stále častěji zapojovat moderní počítačem podporované systémy schopné záznamu a ukládání naměřených dat pro pozdější vyhodnocení – tzv. datalogger.

Hlavním cílem soutěžní práce bylo vytvoření sady podrobně rozpracovaných návodů na středoškolské experimenty s dataloggerem tak, aby tyto návody splňovaly co nejvíce následujících podmínek:

- Forma návodů by měla vyhovovat co největší části vyučujících.
- Návody by mělo být možné použít při frontálním předvádění experimentů i jako výchozí materiál pro laboratorní práce žáků.
- Zpracování naměřených dat by svými přesahy mělo využívat znalosti z ostatních předmětů (zejména matematiky, chemie a IKT).
- Ke zpracování měření by měla existovat rozšíření, stupňující obtížnost úlohy. Cílovou skupinou těchto rozšíření by měli být zájemci o fyziku, seminaristé apod.

Aby mohly vytvářené návody dostat první ze zmíněných podmínek, je úvod práce věnován orientačnímu průzkumu, který měl mezi vyučujícími fyziky zjišťovat, jakou formu návodů preferují, jak inspiraci pro experimentální obohacení své výuky získávají.

Z tohoto průzkumu vyplynulo, že nejvhodnější formou zpracování návodů je souvislý text doplněný ilustračními obrázky, který provedení daného experimentu popisuje poměrně detailně – jen malá část ze 160 respondentů si při obohacování své výuky o experimenty vystačí s heslovitým popisem postupu. Chce-li dnešní fyzikář zařadit do své výuky experiment (a ne nutně pouze s použitím dataloggeru), začne nejčastěji hledat na internetu, teprve poté bere do ruky učebnici. Oblibu internetu coby hlavní databáze fyzikálních experimentů potvrdila i rešerše již existujících návodů, kterou tato práce zahrnuje.

Jak již bylo zmíněno výše, hlavní částí práce bylo vytvoření nových návodů na experimenty. Velmi široké téma „experimenty z fyziky“ jsem v této práci zúžil na téma energie, jejích přeměn a zachování, a to ze dvou hlavních důvodů – zprv je toto téma určitým pojítkem velké části středoškolské fyziky, zadruhé právě oblast molekulové fyziky a termiky (kam velká část pojednání o energii spadá) je ve výuce spjata zejména s teoretickým přístupem a experimenty se v ní objevují bohužel spíše výjimečně.

Každý ze vzniklých návodů obsahuje tyto části:

- Anotace, provázání s tematickými výstupy Rámcového vzdělávacího programu pro gymnázia.
- Teoretický úvod, seznamující se zkoumanou problematikou.
- Seznam použitého měřicího vybavení a pomůcek, stručný princip činnosti senzorů.

- Popis provedení měření.
- Popis zpracování měření – vyhodnocení některých kvantitativních ukazatelů, výpočet veličin, práce s grafy – odečítání hodnot, aproximace příslušnými křivkami apod.
- Sekce „Na co si dát při předvádění experimentu pozor“ – umožňuje vyučujícímu, aby se při demonstraci vyhnul nepříjemným neočekávaným situacím.
- Otázky a úlohy pro studenty.
- Případná rozšíření.

Součástí soutěžní práce jsou celkem čtyři podrobně zpracované experimenty:

- **Kam se ztrácí energie:** Experiment umožňuje názorně studovat vzájemné přeměny kinetické a potenciální energie skákajícího míčku, ale také postupnou přeměnu mechanické energie míčku v elastickou energii míčku a podložky.
- **Izotermický děj:** Experiment nabízí velmi rychlé proměření Boyleova – Mariottova zákona a následnou aproximace naměřených závislostí modelem ideálního plynu a modelem van der Waalsova plynu; rozšíření se věnuje různým způsobem výpočtu látkového množství.
- **Tuhost pružiny:** Jednoduché vyvození vztahu mezi silou deformující pružinu se závažím a aktuálním prodloužením této pružiny.
- **Tepelná izolace:** Kvalitativní experiment demonstrující pomocí jednoduchých pomůcek chování tepelných izolantů a tepelných vodičů.

Během května 2012 budou všechny návody obsažené v této práci publikovány na FyzWebu.

TVORBA FYZIKÁLNÝCH APPLETOV V JAVE

Petra Špiláková

školiteľ: doc. RNDr. Miroslava Ožvoldová, CSc.

Trnavská univerzita, Pedagogická fakulta, Katedra fyziky, Priemyselná 4, 918 43 Trnava

petra.spilakova@gmail.com

Úvod

Dnešná informačná spoločnosť sa vyznačuje stále sa zrýchľujúcim vývojom moderných informačných a komunikačných technológií (IKT). Tento fenomén doby sa odzrkadľuje aj na modernom edukačnom procese na všetkých typoch a stupňoch škôl v podobe nových metód, foriem a stále sa rozširujúcich nových elektronických vzdelávacích materiálov. Napriek tomu, že je v mnohých prípadoch na ich zavedenie žiaduci pomerne vysoký vstupný vklad, ako finančný, tak nárokmí na učiteľa, vráti sa v podobe zefektívnenia vyučovania, atraktivity pre študentov a v neskorších úsporách, napríklad za prenájom výučbových priestorov, cestovných nákladov, lektorov a písacích potrieb v prípade online kurzov .

Pri vyučovaní fyziky sa učiteľ dostáva často do situácie, kedy má objasňovať javy prostredníctvom demonštrácie experimentov s ním súvisiacimi, však nemá technické vybavenie, alebo jav v reálnych podmienkach sa nedá realizovať. Učítelia, ale i študenti v týchto prípadoch, vďaka novým technológiám, majú možnosť siahnuť po simuláciách daného javu, prezentovaných vo väčšine prípadov, formou interaktívnych Java appletov (t.j. naprogramovaných aplikácií na základe zvolených modelov). Applety sú v hojnej miere dostupné na internete. Avšak tvorivý učiteľ by si mnohokrát rád vytvoril sám, resp. spolu so žiakmi interaktívne simulácie, šité na jeho potreby a predstavy vysvetľovania. Aby učiteľ fyziky zvládol túto činnosť, napriek tomu, že nemusí mať dostatok skúseností a zručností v programovaní a času na štúdium, pripravili sme elektronický študijný materiál ako zvládať ľahšie tvorbu appletov.

Ciele práce

Práca predstavuje vytvorenú elektronickú vzdelávaciu pomôcku „Tvorba Java appletov“, ktorá má za cieľ ukázať a uľahčiť čitateľovi: a) tvorbu appletov, b) implementáciu interaktívneho appletu do edukačného procesu prostredníctvom prezentácie dvoch realizovaných fyzikálnych Java appletov, spolu s odpovedajúcim fyzikálnym základom, kontrolnými otázkami, testovaním vedomostí s okamžitým vyhodnotením a úlohami súvisiacimi s fyzikálnym obsahom appletov. Záverom práce diskutujeme porovnanie experimentálnej činnosti prostredníctvom dvoch typov e-experimentov: reálneho vzdialeného experimentu „Voľný pád“, a virtuálneho, ktorým je práve vytvorená interaktívna simulácia.

Elektronická pomôčka „Tvorba Java appletov“

Elektronický vzdelávací materiál je prezentovaný prostredníctvom webovej stránky zameranej na tvorbu appletov v Jave. Pohľad na jej štruktúru prezentuje obrázok 1, z ktorého vidíme, že sa skladá z teoretickej časti, tak praktickej časti. Teoretická časť sa zaoberá Javou a tvorbou appletov - ľavá strana panelov pomôcky a obsahuje: Teória, Tvorba appletov, Moje applety. Každá kapitola je rozdelená do hlavných kategórií. Ponúka realizované štyri applety: Malá násobilka na prstoch, Veľká násobilka na prstoch, Voľný pád, Archimedov zákon. Na pravej strane pomôcky (zhora nadol) sa nachádza menu s odkazmi na dve kapitoly: Stránky s appletmi (voľne prístupné z internetu) a Zábava. Opäť každá kapitola je rozdelená do viacerých kategórií. V jednej je prezentácia i vzdialených reálnych laboratórií.



Obrázok 1 Elektronický vzdelávací materiál určený na tvorbu appletov v Jave

Fyzika s využitím appletov

Interaktívny applet nám umožňuje nastavovať rôzne vstupné podmienky experimentu (parametre appletu) a následne pozorovať zmeny závisle premennej. Webové stránky s Java appletmi sú tak nástrojom, ktorý umožňuje učiteľovi vytvárať nové typy úloh a učebných textov za pomoci simulácií. Tým učiteľ vytvára niečo, čo môžeme nazvať interaktívny učebný materiál [1]. V práci predstavíme dva applety, prezentujúce fyzikálne deje, s ktorými sa stretávame každodenne: Archimedov zákon a Voľný pád:

Applet -Archimedov zákon

Cieľom pripraveného appletu je, aby experimentátor mohol, na základe aktívneho „hrania sa“ s appletom a jeho voliteľnými parametrami, ľahšie pochopiť známy fyzikálny zákon a v prípade potreby si doplniť teoretické vedomosti. O tom, aké sú jeho vstupné a výstupné vedomosti má možnosť zistiť prostredníctvom testových otázok s okamžitým vyhodnotením správnosti odpovede. Applet ponúka výber nasledovných parametrov: objemu telesa, ktoré ponárame, hustoty telesa, kvapaliny do ktorého teleso ponárame a tiažového zrýchlenia. Má možnosť sledovať ako sa mení výsledná sila pôsobiaca na ponárané teleso

v závislosti od vybraných podmienok. Applet poskytuje numerický aj grafickým výstup, v podobe animácie a grafu (obrázok 2). Experimentátor má možnosť dokonca „realizovať“ ponáranie telesa do kvapaliny i na inej planéte, alebo na základe experimentu určiť na akej planéte sa virtuálny experiment realizuje.



Obrázok 2 Java applet Archimédov zákon zobrazujúci konečný stav simulácie pre hodnoty: $V = 6 \text{ dm}^3$; $\rho_t = 916,8 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$; $\rho_k = 1261 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$; $g = 9,1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$

Applet - Voľný pád

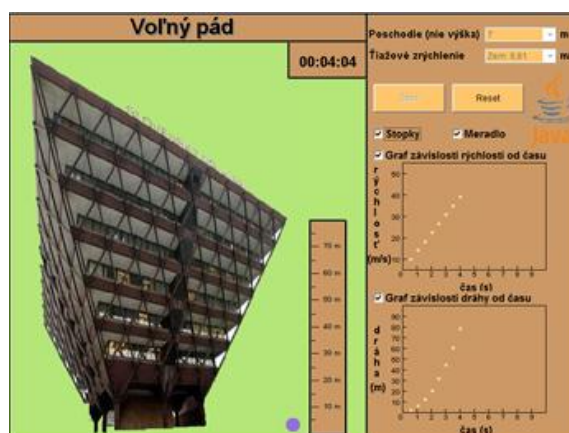
Voľný pád je špeciálny prípad pohybu rovnomerne zrýchleného s nulovou počiatočnou rýchlosťou. Simulácia vychádza z modelu, že sa jedná o pohyb telesa voľne pusteného v blízkosti povrchu Zeme vo vákuu. Blízkosť povrchu Zeme je dôležitý pre predpoklad, že tiažové zrýchlenie g je konštantné. Druhý predpoklad modelu pre simuláciu je, že sa jedná o pohyb vo vákuu. Je dôležitý preto, aby teleso nebolo nadľahčované vzduchom a nepôsobili na neho odporové sily a neberie sa do úvahy zmena g s nadmorskou výškou a zemepisnou šírkou [2]. (Rozšírenie appletu týmto smerom sa zvažuje v blízkej budúcnosti).

Cieľom appletu je skúmať priebeh voľného pádu telesa v aproximácii hmotného bodu, pri ktorom neuvažujeme odpor prostredia. Pohľad na stránku appletu prezentuje obrázok 4. Vstupnými parametrami sú: číslo poschodia, (k tomuto bodu sa vzťahuje i počiatok zvolenej súradnicovej sústavy). Dá sa zvoliť z hodnôt 1 až 7, pričom je zadaná výška jedného poschodia; zrýchlenie telesa na všetkých planétach Slnecnej sústavy, doplnených o mesiac Zeme. Ako neznáme je v applete uvádzané zrýchlenie na Mesiaci a Merkúre.

Existencia reálneho vzdialeného experimentu „Voľný pád“ (obrázok 3), fyzicky umiestneného na Katedre fyziky PdF TU, voľne prístupného cez e-laboratórium (<http://kf.truni.sk/remotelab> alebo priamo odkaz na experiment cez adresu <http://remotelab4.truni.sk/position.html>) nám umožňuje porovnať merania prostredníctvom virtuálneho a reálneho vzdialeného experimentu, ktoré sme realizovali. Je to novinka v experimentátorskej praxi vďaka práve najnovším informačným technológiám. Takéto spojenie reálneho a virtuálneho experimentu je cenné a zatiaľ nie často využívané pri výučbe objasňovania javov reálneho sveta okolo nás.



Obrázok 3 Vzdialený reálny experiment s na meranými dátami (<http://remotelab4.truni.sk>)



Obrázok 4 Java applet „Voľný pád“ ($h = 80 \text{ m}$; $g = 9,81 \text{ ms}^{-2}$)

Záver

Prezentovali sme nový, nami pripravený, elektronický vzdelávací materiál „Tvorba Java appletov“, ktorý má slúžiť ako študijná pomôcka na tvorbu appletov. Súčasťou tejto pomôcky sú i nami navrhnuté a realizované štyri applety, z ktorých dva sme detailnejšie predstavili v práci.

Pre výučbu fyziky a ľahšie vyhľadávanie a zverejnenie na www stránke, sme časť fyzikálne applety upravili do novej formy: Java applety vo fyzike (Obrázok 5), doplnenej komplexným materiálom skladajúci sa z: motivácie, teórie, otázok, úloh, pracovných listov, testov pre dva prezentované applety. Zámerom i tejto pomôcky je zatriktívniť výučbu fyziky a ľahšie porozumenie zákonitosti problematiky Archimedovho zákona a voľného pádu. Zaujímavosťou experimentálnej činnosti a jej vyhodnotenia je možnosť porovnania dát získaných zo simulácie a dát získaných z reálneho experimentu. V budúcnosti plánujeme materiály overiť v praxi.



Obrázok 5 Elektronický vzdelávací materiál Java applety vo fyzike (zobrazená je úvodná stránka Archimedov zákon)

Literatúra

[1] TULEJA, S. 2010. *Využitie Java appletov vo vyučovaní fyziky*. [online]. Humenné : Gymnázium arm. gen. L. Svobodu, 2010. 4 s. [cit. 2012-04-20]. Dostupné na internete:

<<http://www.stuleja.org/vscience/seminar/pedagogikaAppletov.pdf>>

[2] TEPLIČKA, I. 2005. *Fyzika*. Sered' : Enigma, 2005. 277 s. ISBN 80-85471-58-2.