

Bakalářská témata



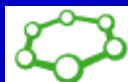
fyzikální a materiálové chemie

Doc. RNDr. Pavel Brož, Ph.D.

*Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie,
Kotlářská 2, 611 37 Brno*



**MU, CEITEC,
Kamenice 5,
625 00 Brno**



CEITEC

Central European Institute of Technology
BRNO | CZECH REPUBLIC

Knudsenova efúzní hmotnostní spektrometrie

Laboratoř termické analýzy

Ústav chemie (<http://ustavchemie.sci.muni.cz/>) → věda a výzkum
→ Laboratoř termické analýzy a KEMS

Měření tenze par

Měření tenzí par látek za vyšších a vysokých teplot

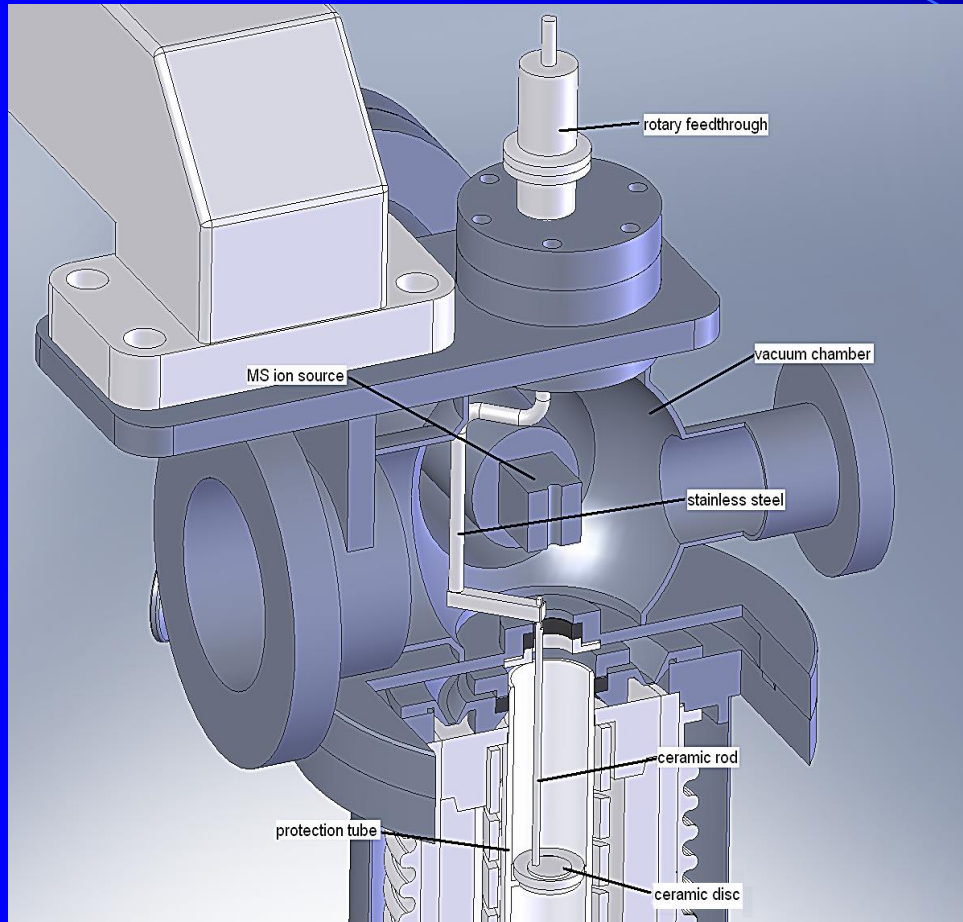
$$I_i \approx P_i$$

(kovy, oxidy, org. látky)

vzorek → efúzní Knudsenova komůrka → hm. detekce

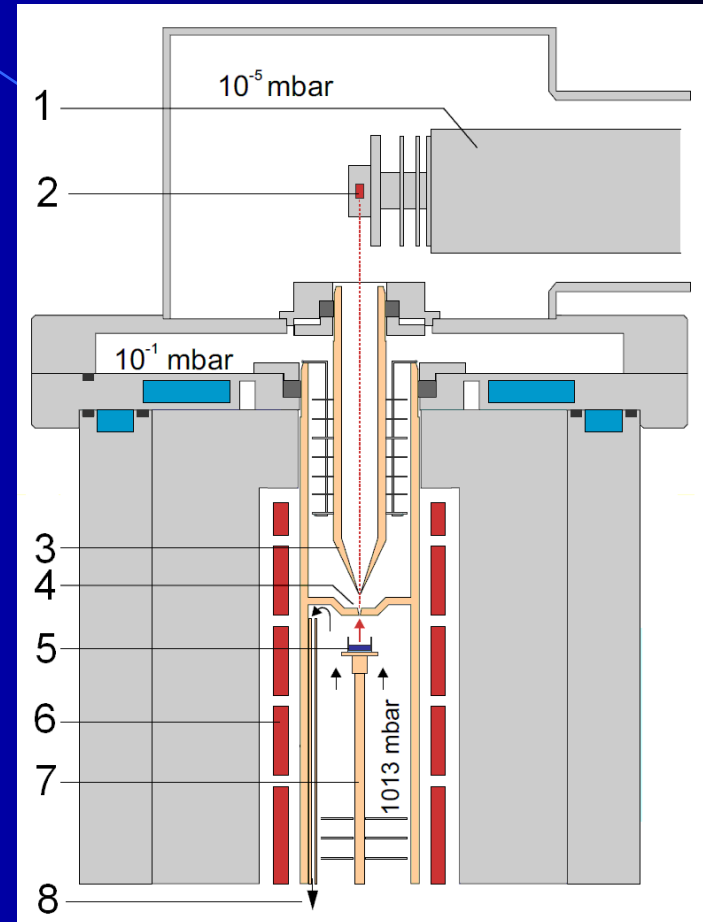
- **Lze získat: termodynamické a analytické údaje detekce a kvantifikace složek a látek**
(*kvalitativní a kvantitativní analýza*)
 - hodnoty TD funkcí (x, T) – **G, H, S**
 - difúzí řízené kinetické děje (t)
 - studium povrchových dějů

Knudsenova efúzní metoda spojená s hmotnostním spektrometrem - úprava



Konstrukční detail přístroje DSC/KC/QMS.

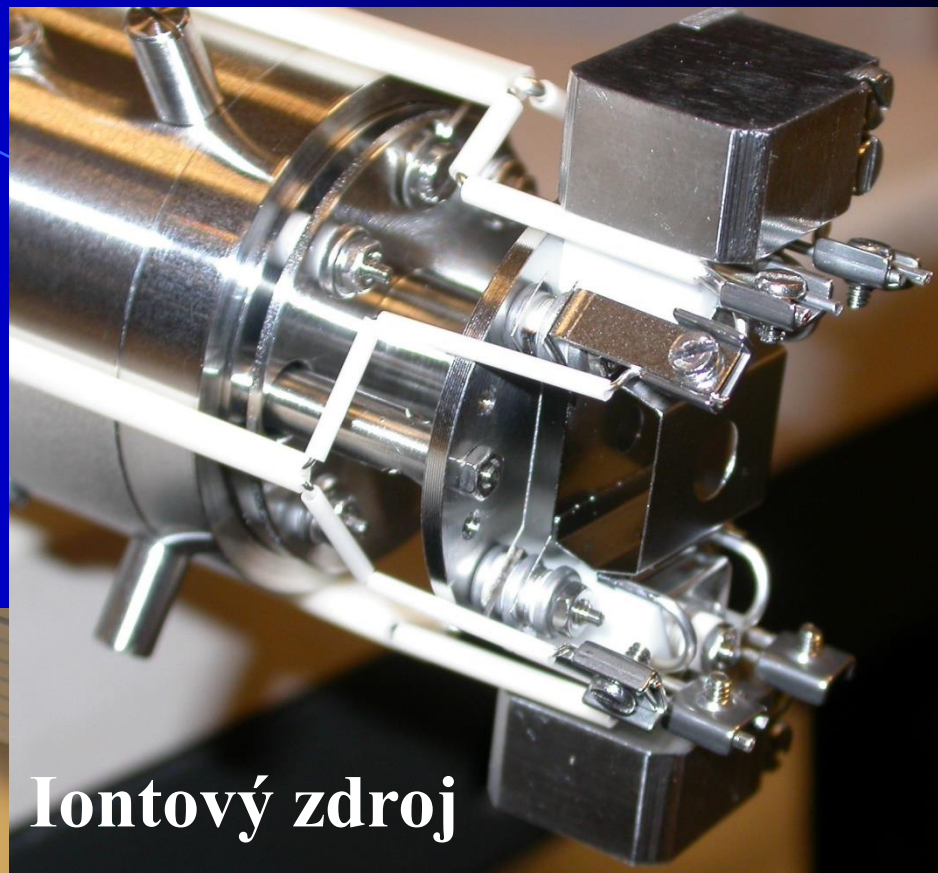
Přístroj není vybaven systémem skimmer, ale keramickým diskem umožňujícím nebo znemožňujícím vstup efundujících částic ze studovaného vzorku.



Spojení přes skimmer.

1. kvadrupólový analyzátor, 2. iontový zdroj, 3. skimmer, 4. otvůrek, 5. vzorek, 6. topení, 7. držák vzorku, 8. odchod plynu

STA 409
CD/3/403/5/G -
podrobnosti



Iontový zdroj



DSC držák vzorků



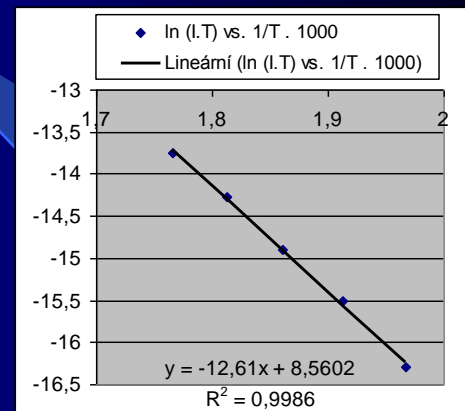
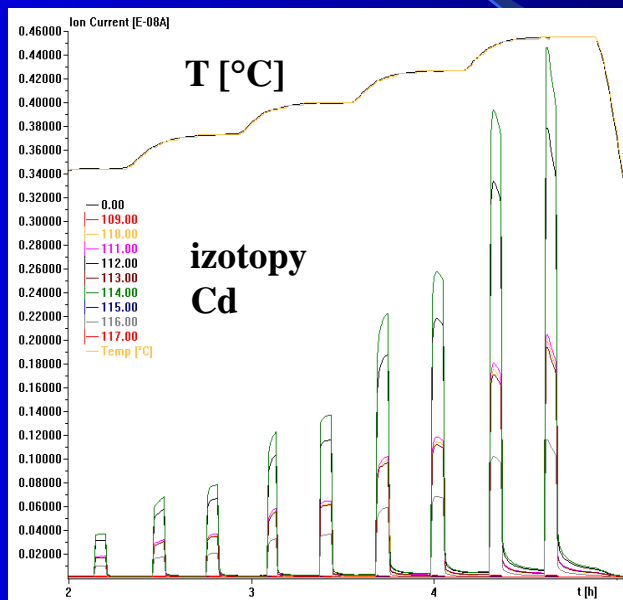
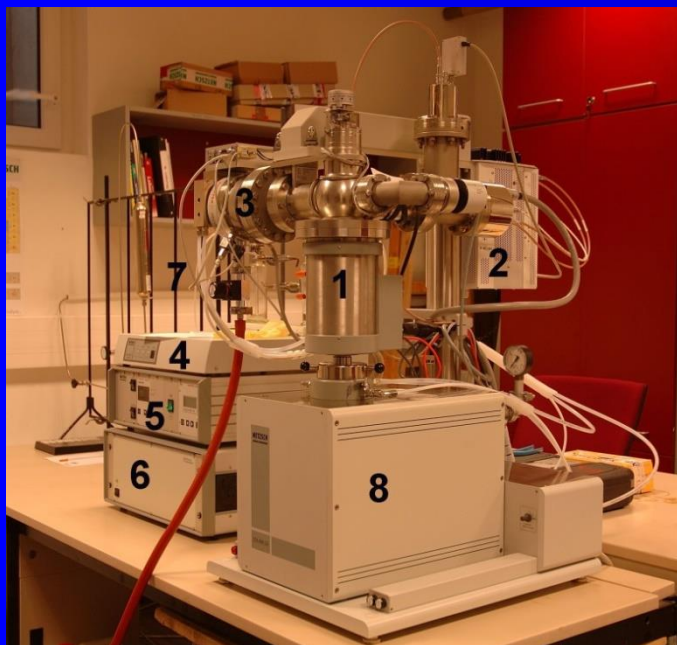
Knudsenova

komůrka



Měření tlaku par složek pro získání termodynamických údajů (G,H,S)

Termická analýza spojená s Knudsenovou efúzní hm. spektrometrií – analýza plynů prostřednictvím MS (DTA/DSC/KEMS-MS)



Arrheniuv graf pro výparné teplo pro Cd

$$\Delta H_{v(tab.)} = 99.87 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$\Delta H_{v(exp.)} = 104.84 \text{ kJmol}^{-1}$$

Tlak par vs. teplota pro Cd (časová závislost iontových proudů)

P. Brož, F. Zelenka, *Int. J. Mass Spectrom.* 383, 13 (2015)

P. Brož, J. Sopousek, J. Vrestal, J. Pinkas, *ECS Transactions* 46(1), 69 (2013)

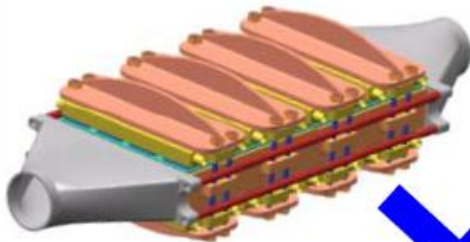
Termická analýza – Měření tenze par - Hmotnostně spektrometrická analýza
 Netzsch STA 409 CD/3/403/5/G 25 -1400 °C - proudící plyn (Ar) / syntetický vzduch
 (do 313 cm³ min⁻¹) nebo vakuum (1·10⁻⁵ mbar) - rychlost ohřevu 0.1 - 50 °C min⁻¹
 hmotnostní rozsah m/z 1 - 512 Da Hm. spektrometr – INFICON AG, Balzers

Studium difúzí řízených kinetických dějů (termoelektrické materiály)

TE Generator Development

Subsystems Modeling
and Design (With General Electric)

Heat Exchanger
Design:



TE Module Design:

Identify primary module design variables

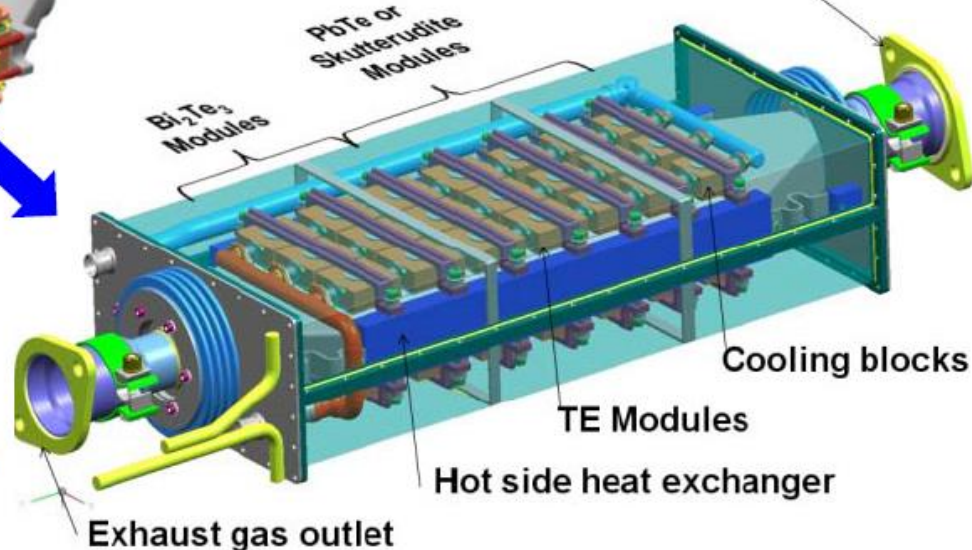
Examine effect on primary output variables:

- (1) Power output,
- (2) Cost,
- (3) Thermo-mechanical durability



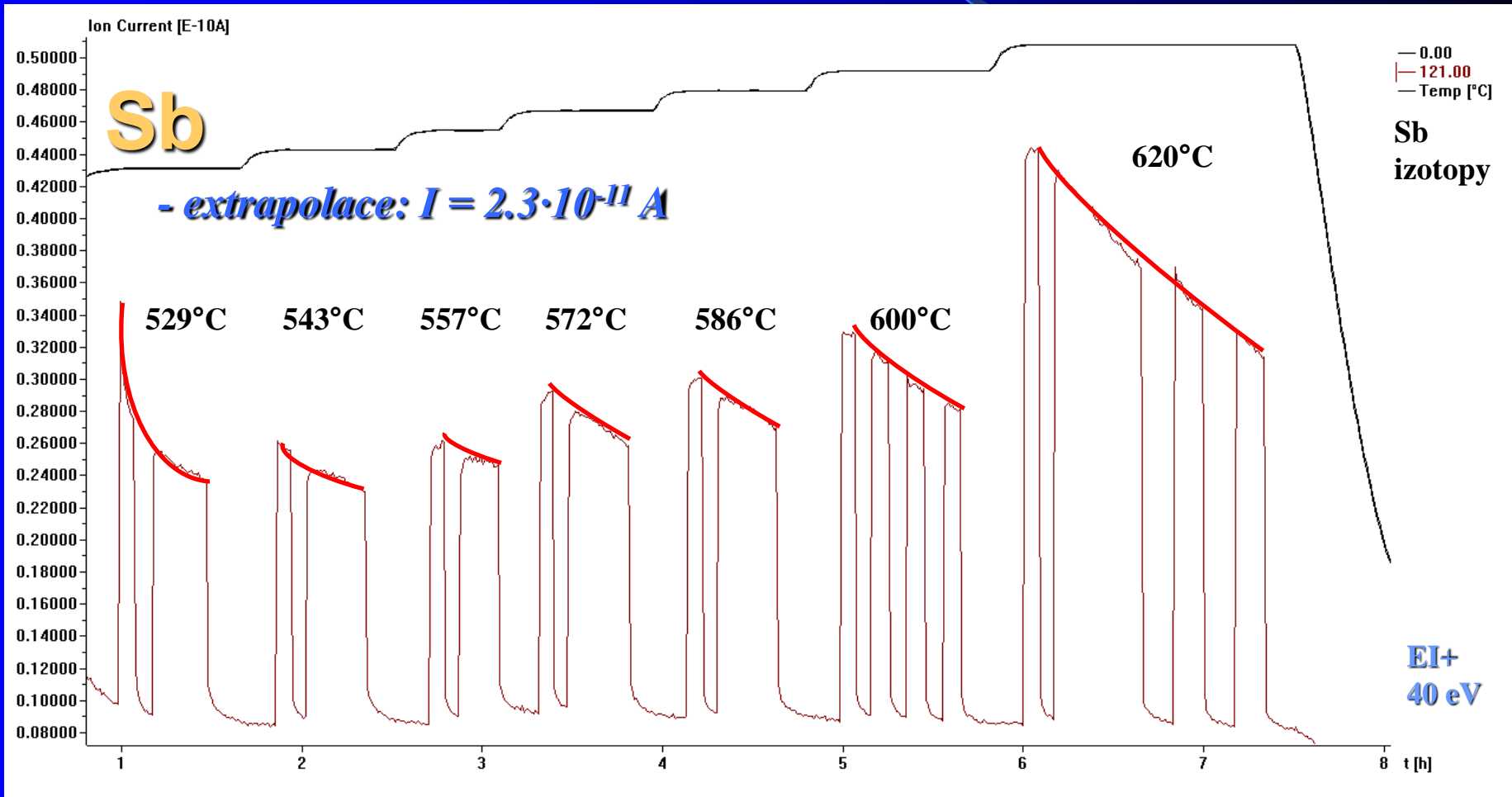
Exhaust gas inlet

TEG Design:
Program metric: \$/Watt



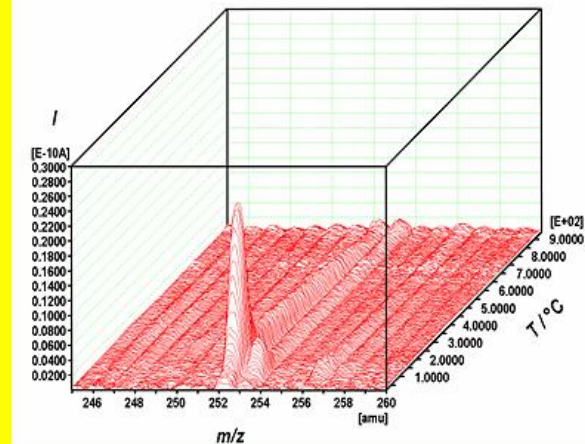
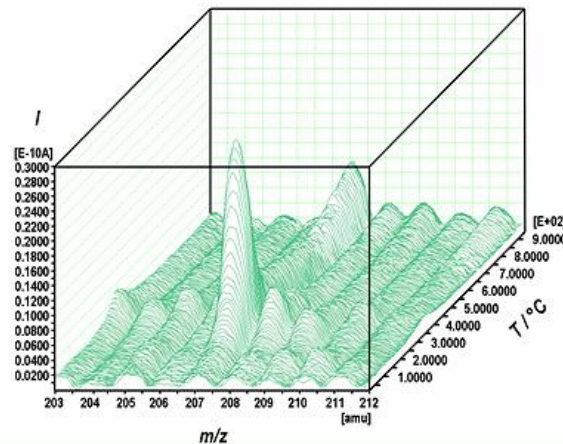
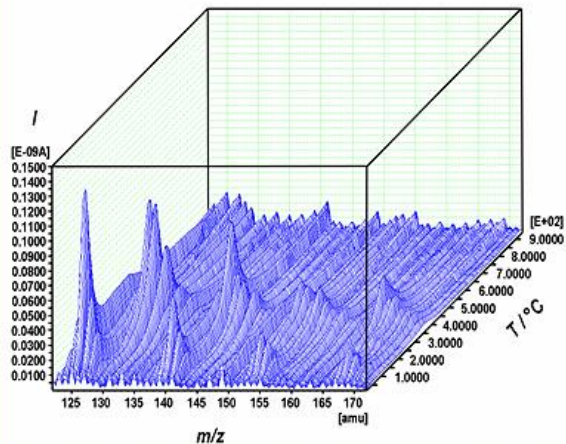
Studium difúzí řízených kinetických dějů (termoelektrické materiály)

KEMS studium termické stability skutteruditu $\text{DD}_{0.6}\text{Fe}_{3.1}\text{Co}_{0.9}\text{Sb}_{12}$



Studium povrchových dějů (nanočástice slitin)

KEMS studium syntetizovaných nanočástic Ag-Cu (20nm) o eutektickém složení



Vybrané části hmotnostních spekter získaných během KEMS ohřevu nano AgCu, (ohřev z 30 na 940°C s rychlostí 5°C min⁻¹), odpovídající teplotnímu programu DSC a ukazující hmoty typické pro oktadecény, oleylamin a oktadecenaly



KC and vnitřní korundový kelímek po měření nano AgCu metodou KEMS

Brož

Syntéza na mokré cestě ze solí kovů v kyselině oleové v oleylaminu a oktadecénu jako prekurzorů je dobře použitelná pro přípravu sférických a v distribuci homogenních nanočástic Ag-Cu, ale organická rozpouštědla během ohřevu reagují s povrchem nanočástic a tvoří “organokovové sloučeniny” což evidentně znemožňuje spolehlivou detekci snížení bodu tání nanočástic během měření metodou DSC.

J. Sopousek, J. Pinkas, P. Brož et al., *Journal of Nanomaterials*, Article Number: 638964 (2014)

Bakalářské práce z fyzikální a materiálové chemie

Témata bakalářských prací

Fyzikální chemie

a

Materiálová chemie

- Využití Knudsenovy efúzní hmotnostní spektrometrie pro měření tlaku par kondenzovaných soustav
- Studium nanočástic prostřednictvím Knudsenovy efúzní hmotnostní spektrometrie
- Přehled o současných termoelektrických materiálech a jejich fyzikálně chemických vlastnostech

Přednášky: - Hmotnostní spektrometrie (jarní semestr)
- Materiálová chemie kovů (jarní semestr)

Projekty: - GAČR: GA 17-12844S (2017-2019)
Tepelná a fázová stabilita pokročilých TE materiálů

ERASMUS+

Chemie

Fyzikální chemie

a

Materiálová chemie

Anorganická chemie

<http://www.sci.muni.cz/cz/Akce/Aktuality/ERASMUS---vyberova-rizeni-na-studijni-pobyty-v-roce-20172018>

Aix-Marseille University, Science and Technology / Chemistry, Physics:

1 student – 5 měsíců

úroveň magisterská/doktorská

obor fyzikální chemie/materiálová chemie

University Vienna, Chemistry / Theoretical Physical Chemistry,
Chemistry / Inorganic Chemistry, Chemistry / Material Chemistry:

2 studenti – 12 měsíců celkem

úroveň bakalářská/magisterská/doktorská

obor anorganická chemie/fyzikální chemie/materiálová chemie

Online přihlašování: **30.1. - 28.2.2017**

na adrese: <https://isois.ois.muni.cz/public/application-outgoing/>