



Pedagogická
fakulta
Faculty
of Education

Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích
University of South Bohemia
in České Budějovice

Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Pedagogická fakulta
Katedra aplikované fyziky a techniky

Diplomová práce

POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ
PLAZMOVÉHO VÝBOJE PRO
BIOMEDICÍNSKÉ A ENVIRONMENTÁLNÍ
APLIKACE

Vypracoval: Bc. Jaroslav Erhart

Vedoucí práce: doc. RNDr. Petr Bartoš, Ph.D.

České Budějovice 2013

Prohlášení

Prohlašuji, že svoji diplomovou práci jsem vypracoval samostatně pouze s použitím pramenů a literatury uvedených v seznamu citované literatury.

Prohlašuji, že v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb. v platném znění souhlasím se zveřejněním své diplomové práce, a to v nezkrácené podobě elektronickou cestou ve veřejně přístupné části databáze STAG provozované Jihočeskou univerzitou v Českých Budějovicích na jejích internetových stránkách, a to se zachováním mého autorského práva k odevzdanému textu této kvalifikační práce. Souhlasím dále s tím, aby toutéž elektronickou cestou byly v souladu s uvedeným ustanovením zákona č. 111/1998 Sb. zveřejněny posudky školitele a oponentů práce i záznam o průběhu a výsledku obhajoby kvalifikační práce. Rovněž souhlasím s porovnáním textu mé kvalifikační práce s databází kvalifikačních prací Theses.cz provozovanou Národním registrem vysokoškolských kvalifikačních prací a systémem na odhalování plagiátů.

V Českých Budějovicích dne 15. června 2013

Bc. Jaroslav Erhart

Anotace

Tato diplomová práce se zabývá možnostmi využití nízkoteplotního plazmatu v různých oblastech vědy, výzkumu a výroby přičemž hlavní pozornost je věnována aplikacím v medicíně a environmentálních aplikacích. V praktické části je pak prezentován návrh počítačového modelu pro simulaci chování plazmatu ve výše uvedených oblastech. Tento model je hybridního typu a jako pracovní plyn je uvažován kyslík.

Klíčová slova: Plazma, počítačové modelování, biomedicína, životní prostředí.

Abstract

This diploma thesis is aimed to the possibilities of using low-temperature plasma in various fields of science, research and production with the main focus is given to applications in medicine and environmental applications. In the practical part is presented design a computer model for simulation of the plasma behavior in the above areas. This model is a hybrid type and as a working gas is used oxygen.

Keywords: plasma, computer modeling, biomedicine, environment.

Poděkování

Moje díky patří především panu doc. RNDr. Petru Bartošovi, Ph.D. za vzorné vedení mé práce, jeho trpělivost, nesčetné konzultace a v neposledním řadě za osobní příklad. Dále bych rád poděkoval vedení Katedry aplikované fyziky a techniky PF JU a jejím členům za konzultační a motivační činnost.

Poděkování patří i výpočetnímu středisku Metacentrum, které poskytlo výpočetní jednotky a prostor pro testování modelu.

Obsah

1	ÚVOD	7
2	PLAZMA	7
2.1.1	<i>Plazma jako čtvrté skupenství hmoty</i>	7
2.2	APLIKACE PLAZMATU	9
3	BIOMEDICÍNSKÉ APLIKACE	23
3.1	POŽADAVKY NA PLAZMA UŽÍVANÉ V BIOMEDICÍNĚ	24
3.1.1	<i>Reaktivní formy kyslíku a dusíku</i>	24
3.1.2	<i>UV záření</i>	24
3.1.3	<i>Elektrický proud</i>	25
3.2	KONKRÉTNÍ APLIKACE	25
3.2.1	<i>Dermatologie</i>	25
3.2.2	<i>Stomatologie</i>	30
3.2.3	<i>Zařízení pro aplikaci plazmatu</i>	33
4	ENVIRONMENTÁLNÍ APLIKACE	39
4.1	ZÁKLADNÍ PRINCIPY	40
4.2	UKÁZKY VYBRANÝCH APLIKACÍ	41
4.2.1	<i>Plazmatické čištění vzduchu</i>	42
4.2.2	<i>Plazmatické čištění vody</i>	45
4.2.3	<i>Sterilizace potravin</i>	50
4.2.4	<i>Další environmentální aplikace</i>	52
5	POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ	54
5.1	POPIS POČÍTAČOVÉHO MODELU	55
5.2	ČÁSTICOVÁ ČÁST MODELU	58
5.2.1	<i>Účinné průřezy</i>	60
5.3	VÝPOČET REAKČNÍCH KOEFICIENTŮ	66
5.4	SPOJITÁ ČÁST MODELU	67

5.5	VÝPOČETNÍ REALIZACE MODELU	67
6	ZÁVĚR	68
7	REFERENCE.....	69

1 Úvod

V současné době je fyzika plazmatu jedním z nejrychleji se rozvíjejících odvětví fyziky. Plazmatické jevy a jejich aplikace se stávají součástí každodenního života nás všech, ať už si to uvědomujeme nebo ne. Tato práce si klade za cíl seznámit čtenáře se současným stavem využívání plazmatu v nejrozšířenějších vědních oborech a jeho aplikacemi. Zvláště se bude zaměřovat na biomedicínské a environmentální aplikace. V těchto odvětvích bude mapovat současný stav vědeckého pokroku, problémy, které jsou aktuální a možnosti zapojení počítačového modelování k řešení těchto problémů.

Dále bude v praktické části navržen hybridní model pulzního plazmatického výboje, zaměřený na analýzu koncentrací různých druhů kyslíkových částic. Tento model bude realizován pomocí paralelizovaného výpočtu v prostředí výpočetního centra a poslouží k výzkumným účelům v rámci projektu GAJU. Získané výsledky napomohou lépe pochopit fyzikální podstatu probíhajících dějů.

2 Plazma

2.1 Plazma jako čtvrté skupenství hmoty

Převážná většina hmoty ve vesmíru, udává se až 99%, je ve stavu plazmatu. Někdy se říká, že jde o tzv. čtvrté skupenství hmoty [1]. Plazma se nachází například v nitrech hvězd, ve slunečním větru, v ionosféře, v zářivkách či v tokamaku. Plazma je tvořeno celou řadou částic, především elektricky záporně nabitými elektrony, elektricky kladně a záporně nabitými ionty, neutrálními částicemi, radikály, molekulami atd. Vznik plazmatu je do určité míry analogický fázovým přechodům, jako je tání ledu či var vody. Ohřevem

můžeme oslabit krystalové vazby a z ledu vytvořit kapalnou vodu nebo uvolnit vazby vodíkových můstků a vodu nechat přejít v páru. Stejně tak i předáním dostatečné energie plynu dochází k dalšímu uvolnění vazeb - mezi atomovým jádrem a elektronem a ke vzniku plazmatu.

Plazma bývá definováno jako kvazineutrální plyn nabitých a neutrálních částic, který vykazuje kolektivní chování. Aby o takovém plynu bylo uvažováno, jako o plazmatu musejí být dodrženy tři základní podmínky.

- Kvazineutralita je stav blízký elektrické neutralitě. To znamená, že zvenku plyn vypadá jako elektricky neutrální, celkový počet kladně a záporně nabitých částic je prakticky stejný. Vložený potenciál, který by mohl způsobit nahromadění náboje v jednom místě, je poměrně rychle odstíněn prostředím plazmatu. Zároveň však není tak neutrální, aby zmizely všechny zajímavé elektromagnetické síly.
- Kolektivní chování pak znamená, že nabitě částice ovlivňují pohyb dalších nabitých částic na poměrně velkou vzdálenost.
- Jako třetí kritérium se uvádí, že plazmová frekvence (vlastní frekvence kmitů elektronů) je vyšší než srážková frekvence.

Tím, že se v plazmatu nacházejí volné elektrické náboje, plazma vykazuje vysokou elektrickou vodivost a reaguje na elektrická a magnetická pole. Tím se jeho chování výrazně liší od chování normálního plynu.

Plazma můžeme rozdělit podle několika hledisek. Nás budou pro případ této práce zajímat především dělení podle teplotní specifikace [2] a podle tlaku [3] pracovního plynu, v němž plazmový výboj hoří. Z hlediska teploty můžeme aplikovat nízkoteplotní a vysokoteplotní plazma.

Nízkoteplotní plazma:

Pro tento typ plazmového výboje je charakteristická teplota částic v rozmezí 10^4 až 5×10^4 K. V plazmatu může být teplota elektronů o několik řádů vyšší než teplota kladně nabitých iontů a neutrálních molekul plynu.

Vysokoteplotní plazma:

Za vysokoteplotní plazma se považuje plazma, ve kterém je střední energie elektricky nabitých částic větší než 100 eV, čemu přísluší teplota částic větší jak 1 MK.

Nízkotlaké plazma:

Je takový výboj, který hoří za výrazně nižších tlaků, než je tlak atmosférický. Aplikace tohoto typu výboje je většinou realizována pomocí reaktorů, v nichž je možné takto nízkých tlaků dosáhnout.

Atmosférické plazma:

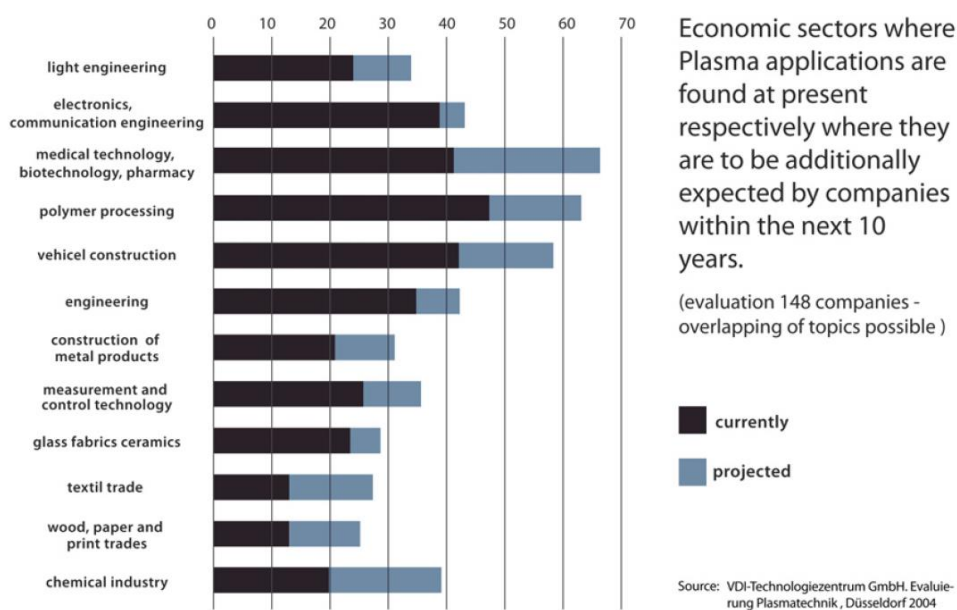
Jak už samotné označení napovídá, jedná se o plazmový výboj, který je možné zažehnout a udržet přímo za běžného atmosférického tlaku. Jelikož tento typ výboje nevyžaduje použití hermeticky uzavřených nádob, v nichž je dosaženo nízkého tlaku, je vhodnější pro většinu každodenních aplikací.

Z hlediska zaměření této práce budeme nejčastěji pojednávat o nízkoteplotním atmosférickém plazmatu.

2.2 Aplikace plazmatu

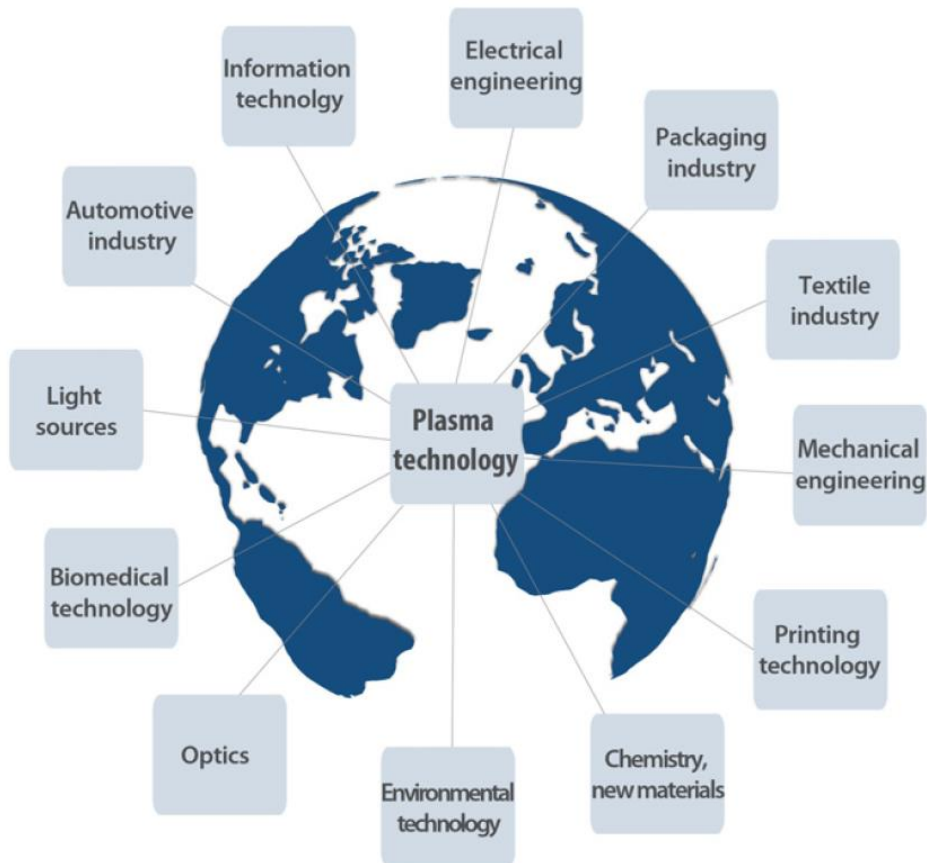
V následující kapitole zmíníme několik oblastí, ve kterých je plazma hojně využíváno. Hlavní myšlenky této kapitoly byly čerpány z rozsáhlého článku [4].

V roce 2004 proběhl výzkum mezi 148 německými firmami, který zjišťoval, kde se dá očekávat využití plazmatu v horizontu dalších deseti let.



Obrázek 1: Přehled využívání plazmových řešení německými firmami [4].

Přesto, že plazma nalézá uplatnění ve většině vědních odvětví, o spoustě jeho aplikací nemá většina lidí podle článku [16] ani tušení. Přitom se s ním setkávají prakticky každý den. Například ve formě: úsporných žárovek, povrchů upravených pro větší smáčivost (tj. pro lepší nanášení barev, nebo lepení), zušlechtěných povrchů, úpravy životního prostředí (odpady, ovzduší), mikroelektroniky, plochých televizorů a dalších.



Obrázek 2: Vědní odvětví využívající plazmatu [4].

Plazma v elektrickém inženýrství

V současnosti se lidstvo potýká se problémy energetické krize a se stále se zhoršujícími projevy nešetrnosti k životnímu prostředí. Je třeba začít řešit otázku, jak udržet současný energetický trend vysoké životní úrovně a zároveň uchovat zdravou přírodu. I zde může pomoci plazma. Díky němu jsou vyvíjeny technologie pro zvýšení efektivity fotovoltaiky i větrných elektráren. Cílem je vytvořit efektivněji fungující motory s vyšším výkonem při snížení náročnosti na spotřebu elektrické energie, nebo vyvinout postup pro uchování elektrické energie pomocí plynových akumulátorů. Zde všude může aplikace plazmatu přinést nové směry a úspory energie viz [5].

Obalový průmysl

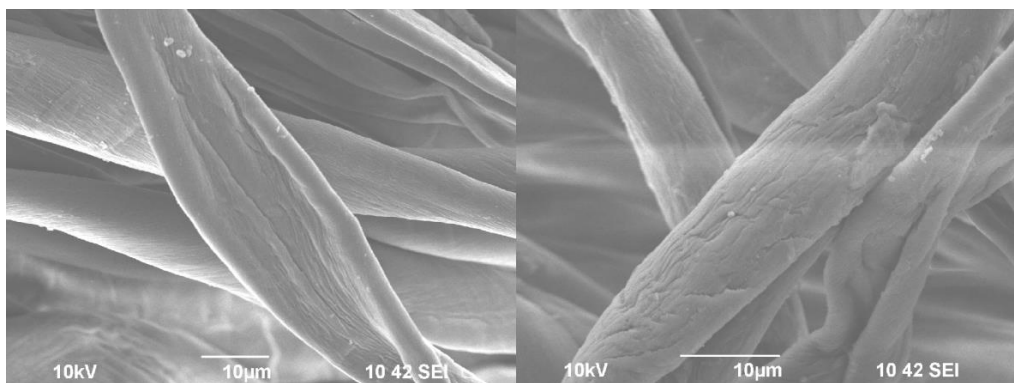
Plazma nalézá uplatnění také v oblasti obalů potravin [6]. Zde se soustředí na před úpravu povrchů. Povrchy upravené plazmatem jsou velmi dobře sterilizovatelné, zabraňují vylučování látek obalu do potravin a mohou zamezovat pronikání látek z prostředí do obsahu. Tím brání jeho znehodnocení.



Obrázek 3: Ukázka sterilizace plastové lahve [6].

Textilní průmysl

Stejně jako ve všech ostatních vědních oblastech také v textilním průmyslu plazma hraje především roli modifikátora materiálů viz [7]. Užití technologie je vhodné pro účel lepšího barvení (zvýšení smáčivosti) textilie, nebo pro ošetření finálního výrobku proti nasákavosti vodou a pro lepší odolnost povětrnostním vlivům (využití nalézá například při výrobě speciálních horolezeckých lan).



Obrázek 4: Vlákno před a po ošetření plazmatem [7].

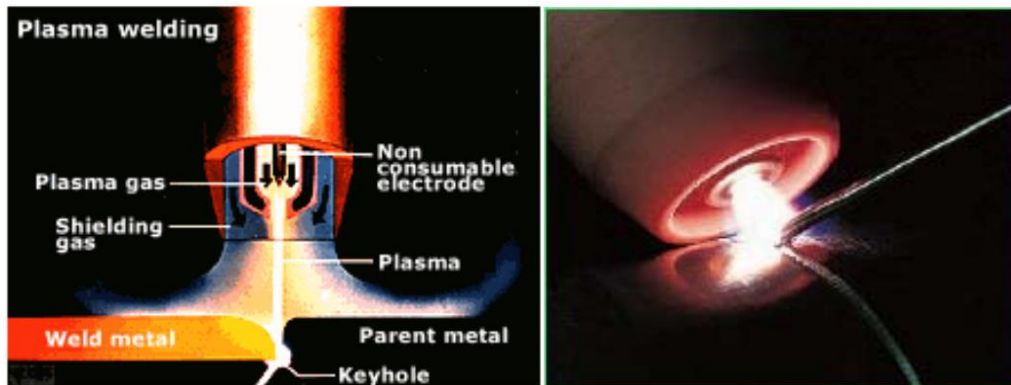
Strojírenství

V tomto odvětví je možností aplikací plazmatu na materiály téměř bezpočet, ale takovou nejtradičnější aplikační formou je svařování plazmatem [8].

- Zdrojem tepla pro natavení vzájemně spojovaných součástí je úzký svazek vysokotlakého plazmatu o teplotě řádově 10 000 °C vystupující nadzvukovou rychlostí z trysky plazmového hořáku.
- Plazmový oblouk
 - Stabilní.
 - Mimořádně dlouhý (až 300 mm).
 - Velmi málo se rozšiřuje.
 - Svarová lázeň je malá.
- Jako plazmový plyn používá pro:
 - Ocel - čistý dusík.
 - Neželezné kovy - argon a vodík.
- Plazmový hořák je chlazen vodou.
- Svařování se provádí jak střídavým tak stejnosměrným proudem.

- Vysoká hustota plazmového plynu v místě svaru umožňuje použití svařování průchozím paprskem, který při průchodu celou tloušťkou svařovaného materiálu současně natavuje obě plochy svařovaných dílů. → Má tu přednost před svařováním metodou WIG, že do tloušťky 12 mm lze svařovat bez úkosu a přídavného materiálu (při větších tloušťkách je zkosení podstatně menší než u metody WIG).
- Svařovat lze všechny druhy materiálů, které se svařují metodou WIG.
- Výhody:
 - Malé deformace.
 - Dobrý vzhled svaru.
 - Ovlivnění svařovaného materiálu je minimální → umožnění svařování materiálů malých tlouštěk.
 - Svařování těžkovitelných kovů.
 - Mikroplazmové svařování umožňuje svařovat fólie o tloušťce 0,06 až 1 mm pomocí speciálních miniaturních hořáků a svařovacích zdrojů.
 - Svařování součástí malých rozměrů (např. svařování miniaturních teplotních čidel, součásti automobilové, letecké, rádiové, raketové techniky).
 - Možnost použití plazmového zdroje k navařování slitin se speciálními vlastnostmi, k provádění kovových nástřiků (povlaky mají dobrou odolnost proti korozi a erozi, jsou žáruvzdorné) práškových materiálů na bázi niklu, hliníku, magnézia, zirkonu.

- o Velký význam má použití plazmového zdroje při dělení (řezání, protlačování) materiálu → dosáhne se velké čistoty řezu.



Obrázek 5: Schéma plazmové trysky a ukázka plazmového svařování [9].

Ve strojírenství je plazmatu využíváno také ke karbonizaci [10]. Karbonitridace je proces úpravy povrchu inženýrských ocelí pro zvýšení odolnosti proti opotřebení, zvýšení únavové pevnosti a odolnosti proti korozi. Jedná se o postup, při kterém je do povrchu materiálu zaveden uhlík a dusík ve vrstvě 10 až 20 μm . Konvenční postupy jsou dvojího druhu.

- Karbonizace provedená pomocí kapaliny, při níž se ošetřovaná součástka ponoří do solné lázně. Tato metoda je velmi účinná, avšak ekologické znečištění je velmi vysoké, především kvůli použitým solím na bázi kyanidu.
- Karbonizace provedená pomocí plynu. I když produkuje značné množství odpadních plynů, je tato metoda k životnímu prostředí podstatně šetrnější. Větší nebezpečí plynné metody spočívá v přesném nedodržení pracovního postupu, při kterém existuje velké nebezpečí rozsáhlého výbuchu. Z výše uvedených důvodů je velká snaha, nahradit tyto postupy ekologičtějšími a bezpečnějšími postupy.

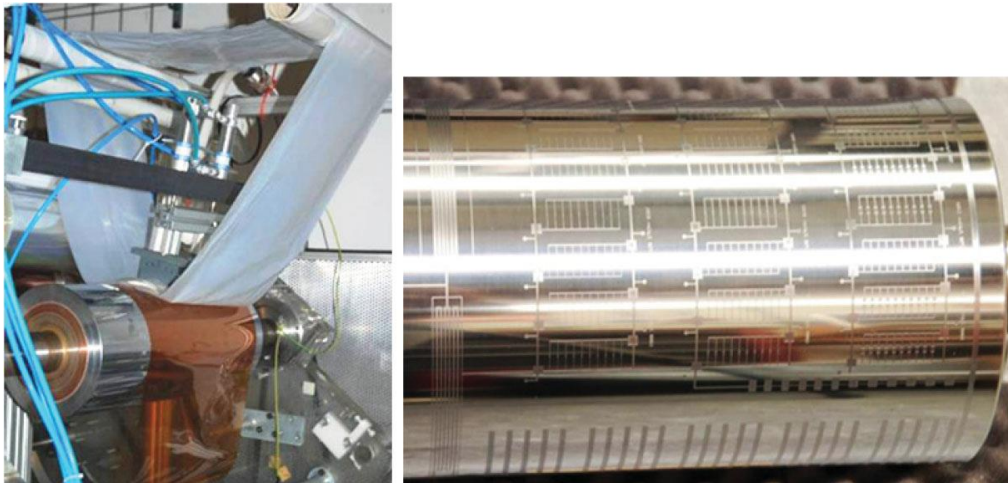
- c) Intenzivní výzkum je v tomto směru realizován v oblasti plazmových technologií. Postup je realizován prostřednictvím plazmového doutnavého výboje, kdy je vpravován uhlík a dusík do materiálu při tlaku 500 Pa. Plazmový proces tedy přináší hned několik výhod oproti klasickému postupu založenému na teplotním rozkladu.

Výhody karbonitridace plazmatem:

- minimum toxických produktů nebo výparů.
- žádné riziko výbuchu.
- minimum znečištění, hluku, tepla, nebo špíny.
- kratší čas na ošetření materiálu.
- nižší spotřeba energie.
- nižší spotřeba pracovních plynů.

Plazma v oblasti tisku

Plazma nalézá uplatnění i v tak běžné věci jako je tiskárna. Plazma zde má ten úkol, že pomocí svého výboje vytváří jakýsi předotisk tištěného obrazu, na který je následně umístěn toner [11]. Tak tiskárnu známe všichni, ale plazma se uplatňuje i v tisku komplikovaných integrovaných obvodů. Na počátku je destička pokryta souvislou vrstvou vodivého materiálu. Plazma do této destičky vypálí složité, velmi tenké kanálky, kterými od sebe jednotlivé vodivé části oddělí a vytvoří požadovaný elektrický obvod.



Obrázek 6: Ukázka tisku (vlevo), tiskový válec s vyřitou maticí (vpravo) [11].

Chemie a materiály

Aplikace plazmatu v tomto odvětví spočívá především v modifikaci materiálů chemickou cestou za použití plazmatu [12]. Jedním z typických příkladů je modifikace vytvářením tenkých funkčních vrstev a modifikace povrchů. Tento postup nalézá uplatnění třeba u polymerů. Ty mají tu vlastnost, že jsou obtížně barvitelné a lepitelné. Díky působení plazmatu však může dojít ke změně chemického složení povrchu tak, že dojde ke zvýšení přilnavosti povrchu, což v konečném důsledku vede ke zlepšení barvitelnosti a lepitelnosti.

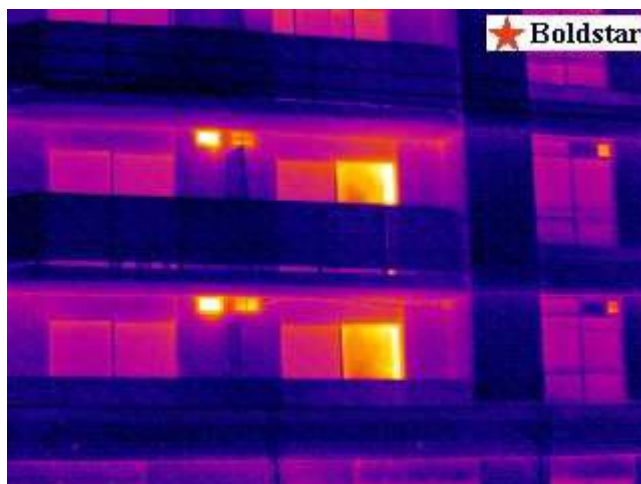
Optika

V optice bývá plazma využíváno nezřídka k výrobě [13]:

- antireflexních nebo naopak vysoce odrazivých vrstev
- filtrů
- ochranných vrstev
- funkčních vrstev



Obrázek 7: Ukázky aplikací plazmatu v optice [13].



Obrázek 8: Ukázky aplikací plazmatu v optice [13].

Světelné zdroje

Inovace v oblasti světelných zdrojů se netýkají pouze velmi dynamicky se rozvíjejících polovodičových LED a OLED světelných zdrojů, ale nová řešení se objevují také u výbojek [14]. Americká firma LUXIM, která se již od

roku 2000 pohybuje v oboru fyziky plazmatu a vysokofrekvenční elektroniky, uvedla v roce 2007 na trh nový typ výbojového světelného zdroje označovaného LEP – light emitting plasma (plazma emitující světlo) – pod názvem LIFI, který díky svým vlastnostem našel uplatnění v několika odvětvích světelné techniky.

Základem tohoto světelného zdroje je křemenný hořák, který je svým tvarem i velikostí podobný známé cukrovince Tic Tac. Hořák je zatmelen v dielektriku válcového tvaru, který je díky své konstrukci využíván ke dvěma účelům: zaprvé jako vlnovod vysokofrekvenční energie a zadruhé jako koncentrátor, který energii soustřeďuje uvnitř hořáku. Tento systém tak umožňuje ionizovat náplň hořáku za účelem generování světelné energie, aniž by bylo nutné do hořáku umístit elektrody, jako je tomu u klasických výbojek. Potřebnou energii na ionizaci směsi inertního plynu a par vhodných kovů vnášených do výbojky ve formě příslušných halogenidů dodává elektronicky ovládaný vysokofrekvenční mikrovlnný zdroj.

Plazmový světelný zdroj díky tomuto novému konstrukčnímu uspořádání vykazuje kombinaci výhodných světelně technických parametrů.

Zásluhou bezelektrodové konstrukce vykazuje plazmový zdroj dlouhou střední dobu života. Podle modelu zdroje může dosahovat až 50 000 h (u klasických výbojek je doba života limitována mimo jiné degradací elektrod). Náhradní teplotu chromatičnosti (T_{cp}) stejně jako index podání barev (R_a) lze ovlivnit náplní hořáku. V současné době firma nabízí několik modelů zdrojů s T_{cp} od 5.300 K do 7.350 K, s R_a od 80 do 95. Plazmový zdroj lze díky digitálnímu ovládaní také stmívat až na 20 % nominální hodnoty světelného toku, který se pohybuje v rozmezí 1.950 až 23.000 lm, s měrným výkonem až 85 lm/W, podle modelu zdroje. Relativně nízké hodnoty světelného toku jsou vykompenzovány možností účinně přerozdělovat světlo optickými částmi svítidla. Podobně jako u diody LED je světelný tok plazmového zdroje

usměrněn pouze do jedné hemisféry, a proto lze v kombinaci s malým hořákem použít jak reflexní, tak refrakční optiku. Tím je dosahováno vysoké účinnosti svítidla. Svítidla s plazmovým zdrojem je možné po vypnutí znovu zapnout po 60 s. Uvedené světelně technické parametry předurčují tento světelný zdroj k použití v široké oblasti světelné techniky.

Výrobce (Luxim) jednotlivé modely optimalizuje pro jejich použití, a proto jsou světelné zdroje rozděleny do několika kategorií. Produktová řada STA je určena k osvětlování venkovních prostorů, infrastruktury nebo průmyslových objektů. Zdroje z produktové řady ENT jsou úspěšně používány v efektním osvětlení, např. česká firma Robe ve svém svítidle Robin 300 Plasma Spot nebo americká firma Seachanger ve svítidle Nemo používají pro jejich vlastnosti právě plazmové zdroje světla LIFI. Řada zdrojů PRJ je konstrukčně přizpůsobena k použití v promítací technice a řada INT se využívá v lékařství jako intenzivní světelný zdroj v mikroskopii.

Automobilový průmysl

Značného využití nalézají plazmové technologie v automobilovém průmyslu [13]. Ze všech oblastí můžeme zmínit:

- úprava vysoce namáhaných povrchů
- úprava skel
- osvětlovací technika
- úprava textílů a plastů v interiéru
- předpříprava dílů před lakováním



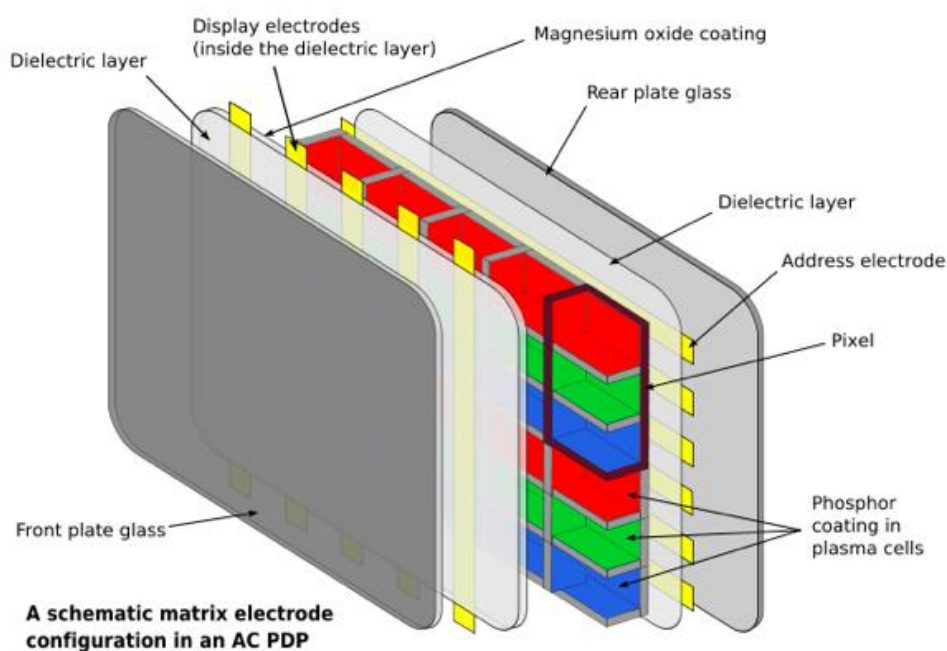
Obrázek 9: Ukázky aplikací plazmatu v automobilovém průmyslu [13].



Obrázek 10: Ukázky aplikací plazmatu v automobilovém průmyslu [13].

Informační technologie

K užití plazmatu v informačních technologiích už neodmyslitelně patří plazmové monitory a televize. Avšak to není jediná aplikace, kterou bychom zde našli. Plazmatu se dále užívá i vytváření složitých integrovaných obvodů velmi malých rozměrů [15], což je ostatně první oblast, ve kterém byly plazmové technologie komerčně využity.



Obrázek 11: Schéma plazmového monitoru [54].

Biomedicína a životní prostředí

S ohledem na zaměření této diplomové práce jsou problematice využití plazmatu v biomedicínských a environmentálních aplikacích věnovány následující dvě samostatné kapitoly.

3 Biomedicínské aplikace

Jak je z grafu na obrázku 1 patrné, tak jedno z největších polí působnosti se plazmatu otevírá v oblasti medicíny, která v sobě spojuje kombinaci fyziky plazmatu, biologické vědy a klinického lékařství. Proto bude tomuto tématu věnována tato kapitola [4].

Jedny z prvních zmínek o aplikaci plazmatu pro medicínské účely sahají až do poloviny 19. století. V této době byla realizována prostřednictvím čištění kontaminované vody ozónem. Následovaly uhlíkové lampy a tzn. „fialové paprsky“. Tyto aplikace však byly čistě experimentální.

Použití plazmatu v biomedicině můžeme rozdělit do dvou hlavních skupin.

- Nepřímé: využití plazmatu pro modifikaci povrchů, materiálů nebo zařízení pro speciální zdravotnické použití.
- Přímé: zde se plazma přímo konfrontuje se živou tkání zvířat a lidí.

V konečném důsledku tedy plazma ovlivňuje v živočišných buňkách nebo na biochemických dráhách tyto faktory:

- Specifické oddělení buněk od jejich matric, jakož i z buněčných svazků.
- Buněčnou migraci.
- Buněčnou proliferaci (bujení) a angiogenezi (tvorba krevních kapilár).
- Expresi proteinů na povrchu buněk/molekul buněčné přilnavosti (integriny, tj. receptory vázající se na jiné matrice či buňky, kadheriny, tj. protejny podílející se na stavbě mezibuněčných spojů).
- Integritu DNA.

- Indukce apoptózy (buněčná smrt), inaktivace nádorových buněk.
- Vratnou buněčnou membránu permeabilizaci ("plasma poration").
- Krevní koagulaci (srážlivost), přímý vliv na koagulační kaskády.

3.1 Požadavky na plazma užívané v biomedicíně

V biomedicíně se využívají různé druhy plazmových výbojů. Ty se liší především vznikem plazmatu, teplotou částic a jeho konkrétní aplikací. Všechny však musejí splňovat nároky na reaktivitu, záření a velikost elektrického proudu.

3.1.1 Reaktivní formy kyslíku a dusíku

Klíčovou složkou plazmatu za atmosférického tlaku je reaktivní kyslík nebo skupiny dusíku. Pokud uvažujeme plazma přípustné pro aplikaci na živou tkáň (nízkoteplotní), pak bude plazmatu dominovat dle [17] převážně kyslík a to ve formě radikálů a jiných typů reaktivních částic (například O_3 , O^+ , O^- , O_2^+ a další viz [20]). Bereme-li v úvahu energičtější plazma, s počáteční teplotou vyšší než $200^\circ C$, jedná se o formu, ve které bude dominovat dusík a jeho skupiny viz [18].

3.1.2 UV záření

UV záření je emitováno plazmovými zdroji většinou jen v nízkých dávkách [19]. Nicméně, i zde je potřeba velká opatrnost, při dlouhodobém působení může být účinek kumulován a může mít velmi škodlivé účinky. UV záření produkované výbojem může mít ovšem také léčebné účinky, a to

především díky své schopnosti napomáhat produkci vitamínu D a likvidovat bakterie, nebo také pomáhá léčit lupénku a vitiligo (odumírání buněk vytvářejících pigment).

3.1.3 Elektrický proud

Již z principu je elektrický proud přítomen u všech plazmatických zdrojů [21]. Při využití plazmatu k ošetření živých tkání je potřeba tuto skutečnost zohlednit a podniknout taková opatření, aby nedošlo v důsledku působení elektrického proudu k poškození tkání.

Právě z hlediska průchodu a ovlivnění těla elektrickým proudem, dělíme ošetření tkáně plazmatem na dva základní druhy, a to na přímou aplikaci a nepřímou.

Přímá aplikace je taková, kdy je k živé tkáni připojena jedna z elektrod a tkání tedy prochází elektrický proud.

Nepřímá aplikace je naopak taková, kde jsou elektrody součástí plazmatického zařízení a tkáň je vystavena pouze záření. Zde tedy není tkáň v přímém kontaktu s elektrickým proudem.

3.2 Konkrétní aplikace

V současnosti jsou nejrozšířenější aplikace především v oblasti dermatologie a stomatologie.

3.2.1 Dermatologie

Dermatologie je vědní obor, který se zabývá kůží, jejími deriváty, poškozením a onemocněními kůže. Plazmové aplikace zde plní hlavně funkci

inaktivizace mikroorganismů znásobujících kožní onemocnění, nebo omezují hojení ran. Používá se tedy pro desinfekci kůže, antisepsi, léčení infekčních onemocnění kůže a hojení ran [22].

Z pohledu dermatologie jsou na ošetření plazmatem kladeny především tyto tři požadavky [24]:

1. Atmosférická aplikace plazmatu tj. pracovat za běžného atmosférického tlaku.
2. Desinfikovat za podmínek optimálních pro růst a prosperitu infekce.
3. Plazma musí být na jedné straně schopno efektivně redukovat mikroorganismy ve tkáni a na straně druhé nesmí poškozovat ošetřovanou tkáň.

Současný výzkum se zaměřuje především na nízko teplotní plazma. Zde se pohybujeme v rozsahu pokojových teplot, které nepoškodí tkáň. Toto plazma nemá prakticky žádný vliv na zdravou tkáň, ale umožní její efektivní dezinfekci a sterilizaci živé tkáně. Během několika sekund zneškodní gram-negativní a gram-pozitivní bakterie, plísňe, viry, spóry, různé parazity a cizí organismy nebo patogeny. Kromě toho, plazma umožňuje řízené, vysoce přesné odstranění tkáně bez zánětu nebo poškození, úpravu tkání na buněčné úrovni s vyhnutím se zánětům a zjizvení. Výhodou jeho plynné formy je možnost proniknout i skrz nehomogenní plochy, dutiny a trhliny až na mikrometrové rozměry, ve kterých tradiční kapaliny nebo chemické postupy selžou. Další velký přínos léčby plazmatem je bezkontaktní, samo sterilizace, bezbolestná, neinvazivní a čistě fyzikální aplikace, která nabízí možnost léčit na molekulární úrovni.

Kožní onemocnění způsobené bakteriemi jsou jedním z hlavních důvodů k hospitalizaci pacientů na dermatologických pracovištích. Odhaduje se, že přibližně 1% populace rozvinuté země trpí infekčními chorobami kůže. Náklady na konvenční léčbu se pohybují mezi 1-2% celkového rozpočtu

zdravotní péče. Tato léčba však zdaleka není vhodná pro všechny pacienty. Narážíme zde na problémy s multirezistivitou bakterií, rezistivitu vůči antibiotikům a s alergickými kožními reakcemi. Tyto problémy u plazmatu prokázány nebyly, naopak pomocí plazmatu můžeme dlouhodobě snížit počty bakterií i u chronicky onemocněných a tím usnadnit léčbu.



Obrázek 12: *Léčba chronického bércového vředu [22].*

Při desetiletém výzkumu bylo působícím plazmatem ošetřeno více než 150 chronicky nemocných pacientů cca 1300 zákroky. Na jednoho pacienta tedy připadalo cca 9 ošetření. Výsledek: žádné vedlejší účinky a prakticky bezproblémová reakce na tento typ léčby [23].

V předběžné analýze 291 ošetření argonovým plazmatem u 36 pacientů klesl počet bakterií o 34% vůči neléčené ráně. Podařilo se odstranit většinu typů bakterií a to i ty multiresistentní. Dále 48 pacientů uvedlo, že dochází k dvakrát rychlejší hojení ran tzv. „diabetické nohy“. Pacienti dále uvedli daleko menší bolestivost po aplikaci plazmatu.





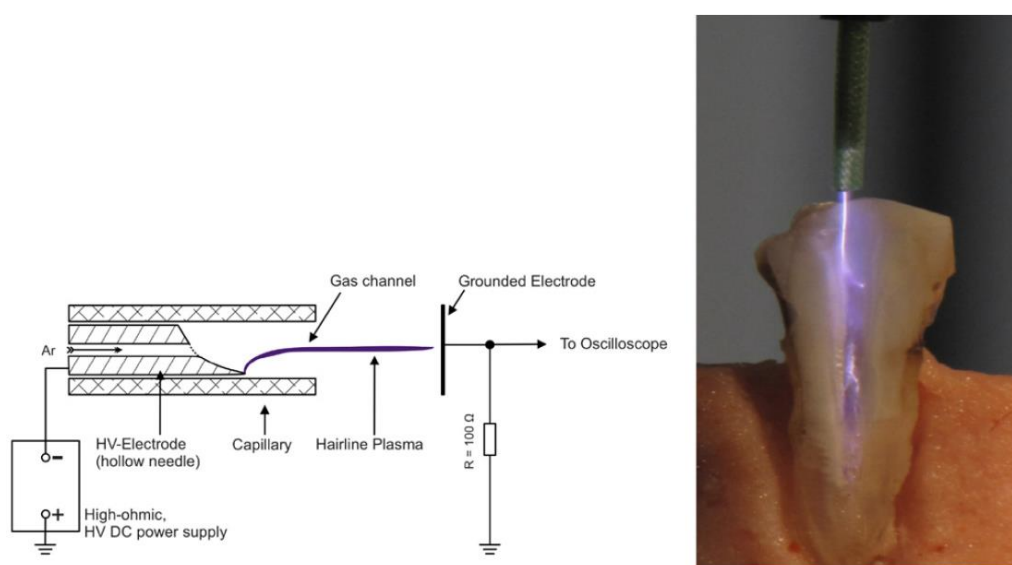
Obrázek 13: *Vývoj léčby: 12 aplikací, 20 aplikací, 5 aplikací v týdnu [22].*

Léčba atopického ekzému pomocí plazmatu je další velmi sledované a slibné odvětví. Kůže bývá kolonizována potenciálně patogenními organismy, které mohou způsobit infekce a ty následně kožní onemocnění. Léčba nízkoteplotní atmosférickou plazmovou tryskou (1-5 kV, 1,5 MHz, argonu) na 3 min. Po aplikaci bylo zjištěno odstranění tohoto ekzému, v míře původního zasažení kůže, zatímco ochranné fyziologické flóry nebyly změněny, ale naopak mobilizovány z hlubší pokožky na povrch.

Jako kuriozitu je možno zde uvést omlazení pleti plazmatem. Zde je princip v narušování pleti pomocí kontrolovaného tepelného poškození kůže. Toto poškození stimuluje kůži k nové produkci kolagenu, zpevnění pleti a vede ke zlepšení poškozené struktury pleti. Pro tento zákrok je potřebné lokální znecitlivění, ale výsledek je srovnatelný s laserovým zákrokem. Plazma má výhodu v minimálním zarudnutí v důsledku rozšíření cév a absenci pigmentové změny v aplikované oblasti.

3.2.2 Stomatologie

Další velmi slibné odvětví, ve kterém má plazma do budoucna své místo, je zubní lékařství. V tomto odvětví se jeho aplikace opět orientují především na sterilizaci a desinfekci tkání [25]. Díky plazmové jehle a plazmové trysce se můžeme dostat relativně velmi malým otvorem do prostoru, kde je třeba provést sterilizaci. Pro čištění kořenového kanálku byla vyvinuta plazmová jehla o průměru 0,7 mm [26]. Ta může být zavedena přímo do kořene zubu a tam následně zapálit plazmový výboj.

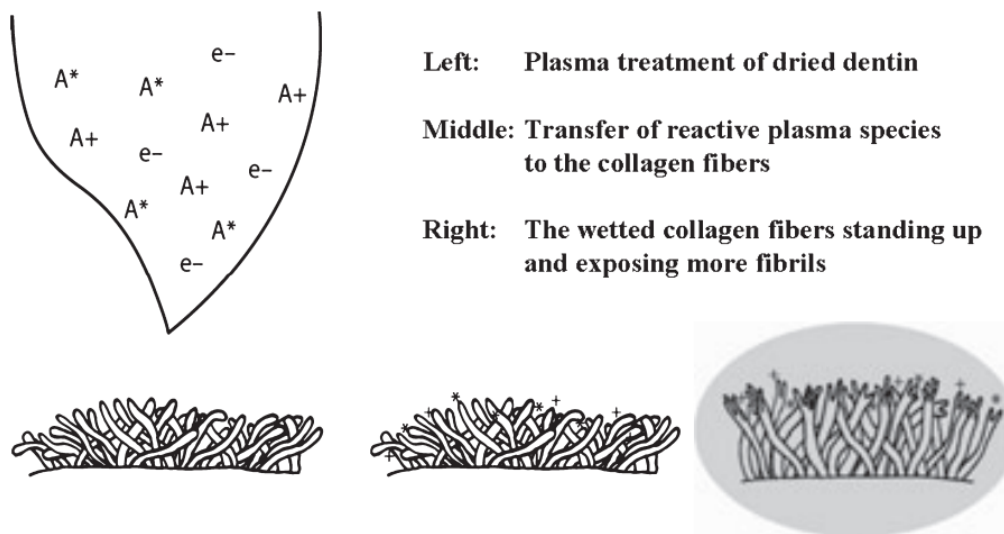


Obrázek 14: *Hairline plasma: konstrukční schéma (vlevo) a použití připraveného kořenového kanálku lidského zubu. (vpravo) (INP Greifswald, Germany) [26].*

Plazma však nenalézá uplatnění jen v léčbě zubních kazů a sterilizaci. Velmi slibné pole se otvírá v oblasti péče o dentin (tj. zubovinu), zubní implantáty a jejich spoje [27]. Díky ožihání jejich povrchu se změní struktura a vlastnosti ošetřené oblasti. Implantát je tím podstatně hladší a neulpívá na něm tolik nečistot, zároveň je i usnadněna péče o takový zub.

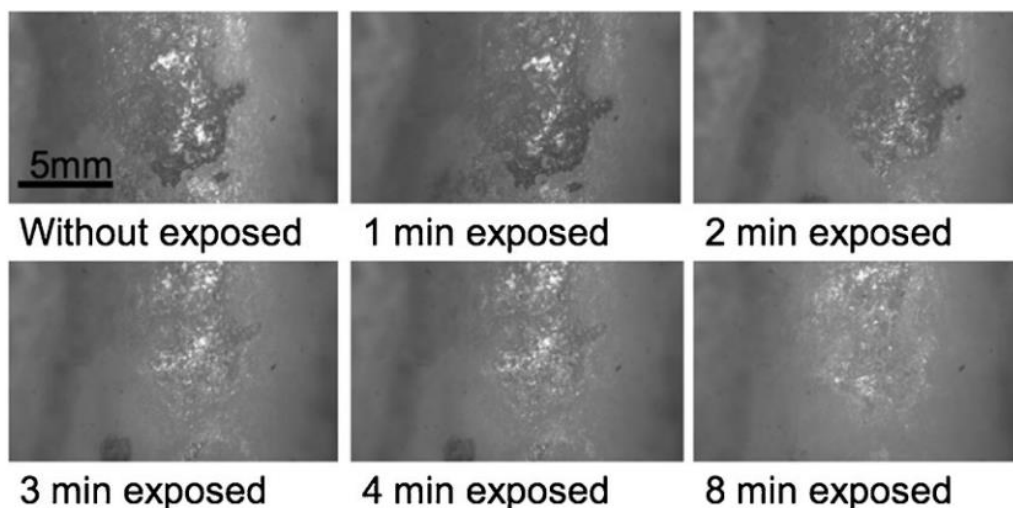


Obrázek 15: *Ošetřování povrchu pro aplikaci korunky na extrahovaném zubu [27].*



Obrázek 16: Schématický obrázek účinku plazmatu na demineralizovaný povrch dentinu [27].

Další častou aplikací je bělení zubů (princip viz článek [28]). Zde narážíme na potřebu velmi silné chemické reakce, která by však vyžadovala pro potřebný efekt značnou teplotu až 60°C. Ta je samozřejmě v tomto prostředí nepřijatelná, především kvůli poškození dásní. Řešení bylo nalezeno v nanášení roztoku H_2O_2 na povrch zubu, zároveň s heliovým plazmovým výbojem. Výsledná hybridní aplikace plyn-vodního plazmatu může dosáhnout potřebně silné chemické reakce a zároveň neovlivní měkké tkáně. Hlavní myšlenka je v tom, že povrch sám není ovlivněn plazmatem přímo, protože je pokryt vodou, ale plazma zesiluje chemickou reakci probíhající v tekutině.



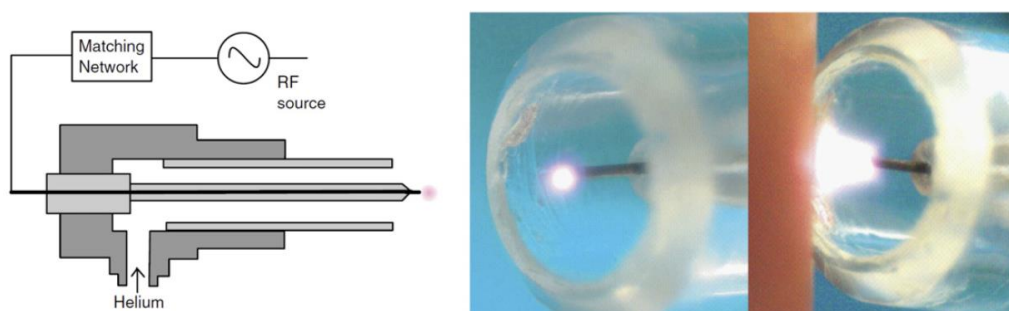
Obrázek 17: *Změna barvy povrchu zubu, v závislosti na délce času ošetření plazmatem [28].*

Ochrana před zubním kamenem spočívá už v prevenci, tj. je nejlepší nenechat ho vůbec utvořit se [29]. Zubní kámen vzniká na místech zubního plaku a zubní plak není nic jiného než biofilm. Tato metoda tedy vychází z předpokladu, že pokud se zbavíme biofilmu, nevznikne ani zubní kámen. V rámci výzkumu [29] byly sledovány biofilmy pěstované se sacharózou a bez sacharózy. Výsledkem je, že po 1 minutě ozařování plazmatem se neobjevil opětovný růst biofilmu u bez sacharózového typu. U druhého typu se sacharózou se růst pouze zpomalil. I tak se ovšem jedná o slibný výsledek, který má potenciál být dále rozvíjen.

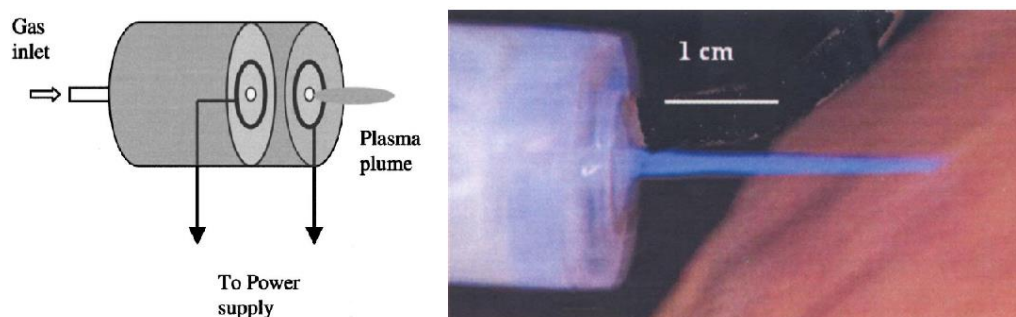
3.2.3 Zařízení pro aplikaci plazmatu

Medicína je jedním z vědních odvětví, která je mimo jiné charakteristická rozmanitostí nástrojů a přístrojů, které potřebuje pro svoji praxi. Ani v oblasti užití plazmatu v medicíně to není jiné. Proto je zde na místě uvést tato zařízení.

Jedná se například o: plasma needle [30] (obrázek 16), atmospheric pressure plasma plume [31] (obrázek 17), atmospheric pressure plasma jet [32] (obrázek 18), plasma brush [33, 34] (obrázek 19), floating-electrode dielectric barrier discharge (FEDBD) [35] (obrázek 20), atmospheric pressure glow discharge torch (APGD-t) [36] (obrázek 21), microhollow cathode discharge air plasmajet [37] (obrázek 22), microwave plasma torch [38] (obrázek 23), plasma jets and microplasma jets [39] (obrázek 24), dielectric barrier discharges [40] (obrázek 25) a nanosecond plasma gun [41] (obrázek 26).



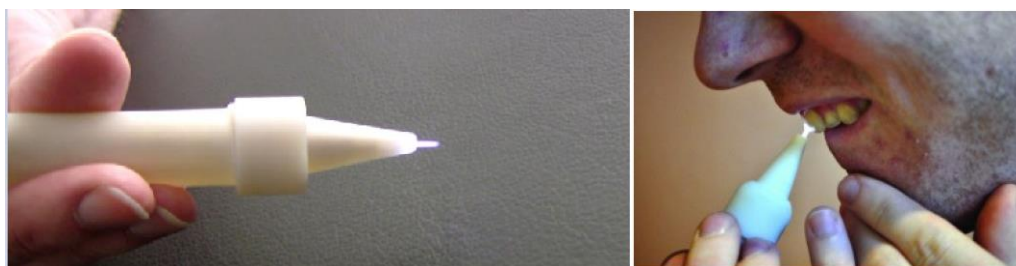
Obrázek 18: Plasma needle- schéma, v unipolárním a bipolárním prostředí.



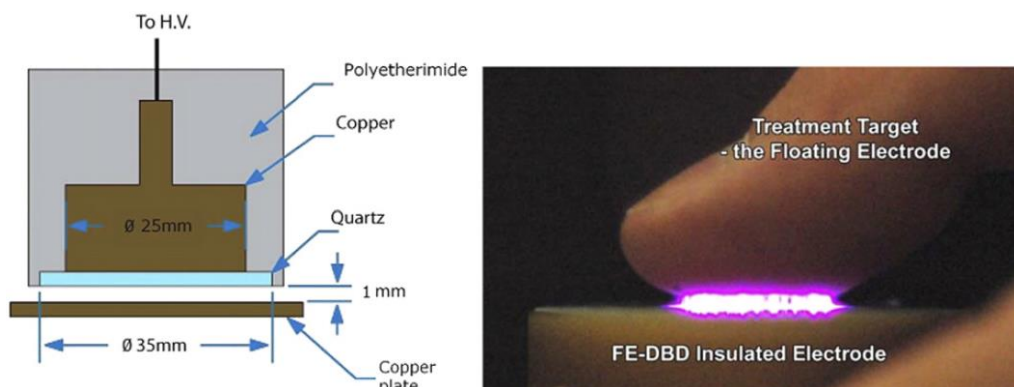
Obrázek 19: Plasma plume: schéma a aplikace.



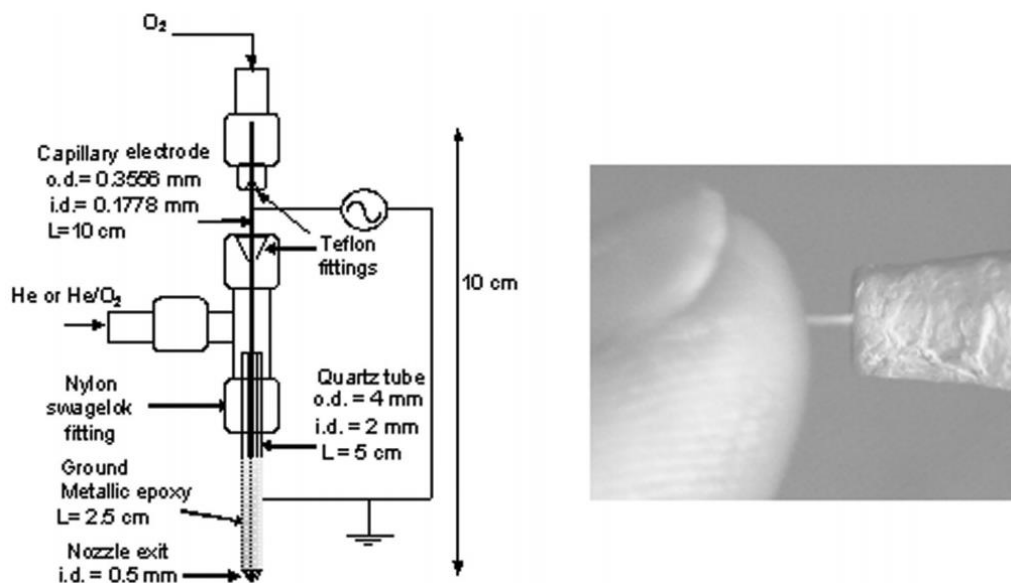
Obrázek 20: Atmospheric pressure plasma jet: Příklad pro aplikaci, schéma.



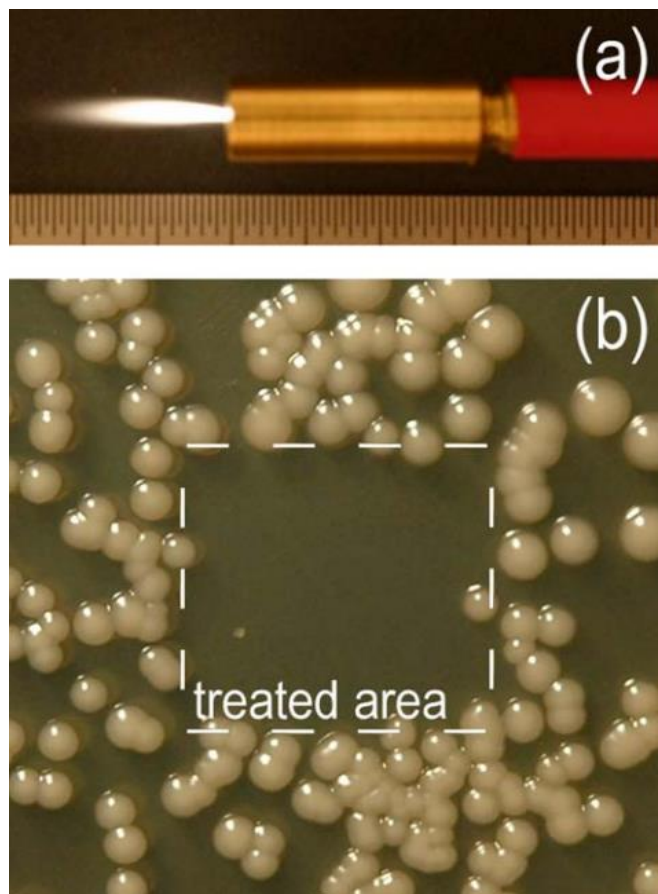
Obrázek 21: Plasma brush, aplikace.



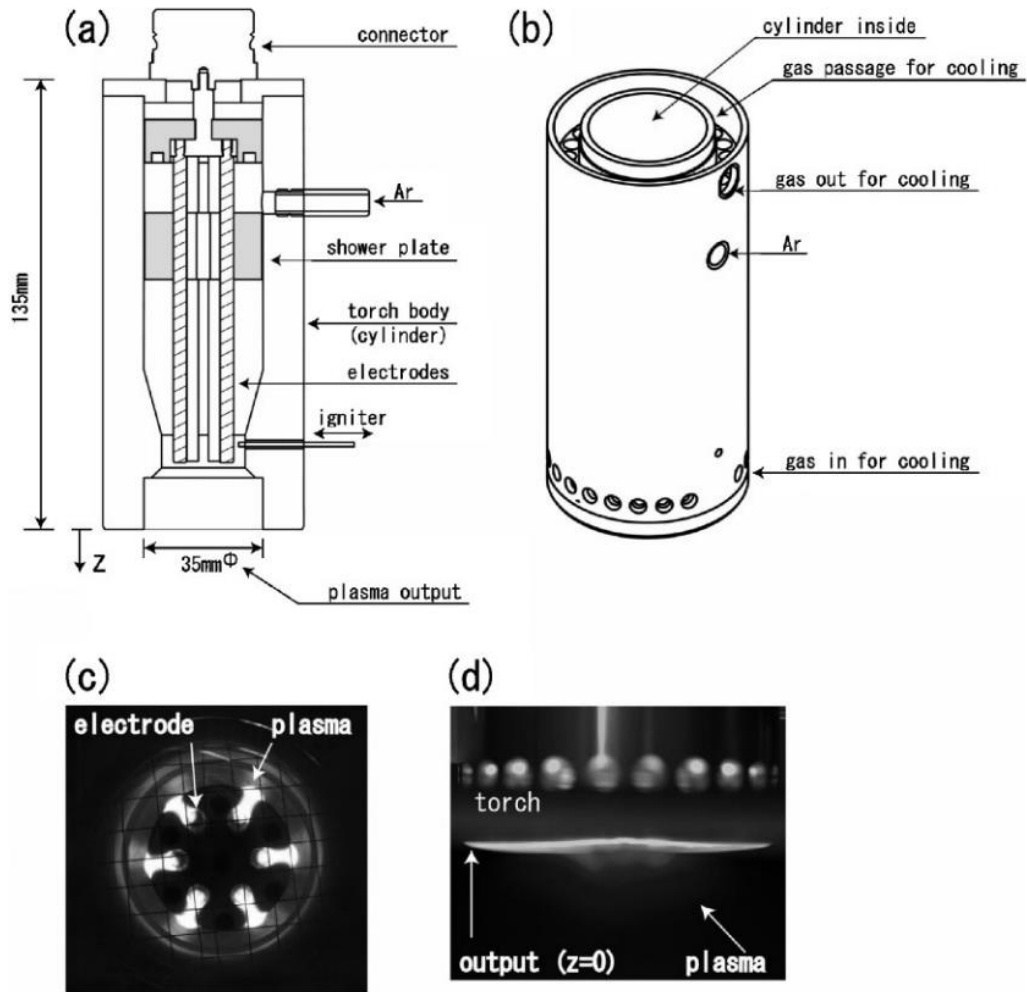
Obrázek 22: Vlevo: Schéma cylindrické kruhové plovoucí bariéry elektrod dielektrického výboje (FE-DBD). Vpravo: FE-DBD v akci (Drexel University, Philadelphia, USA; by courtesy of Greg Fridman) [35].



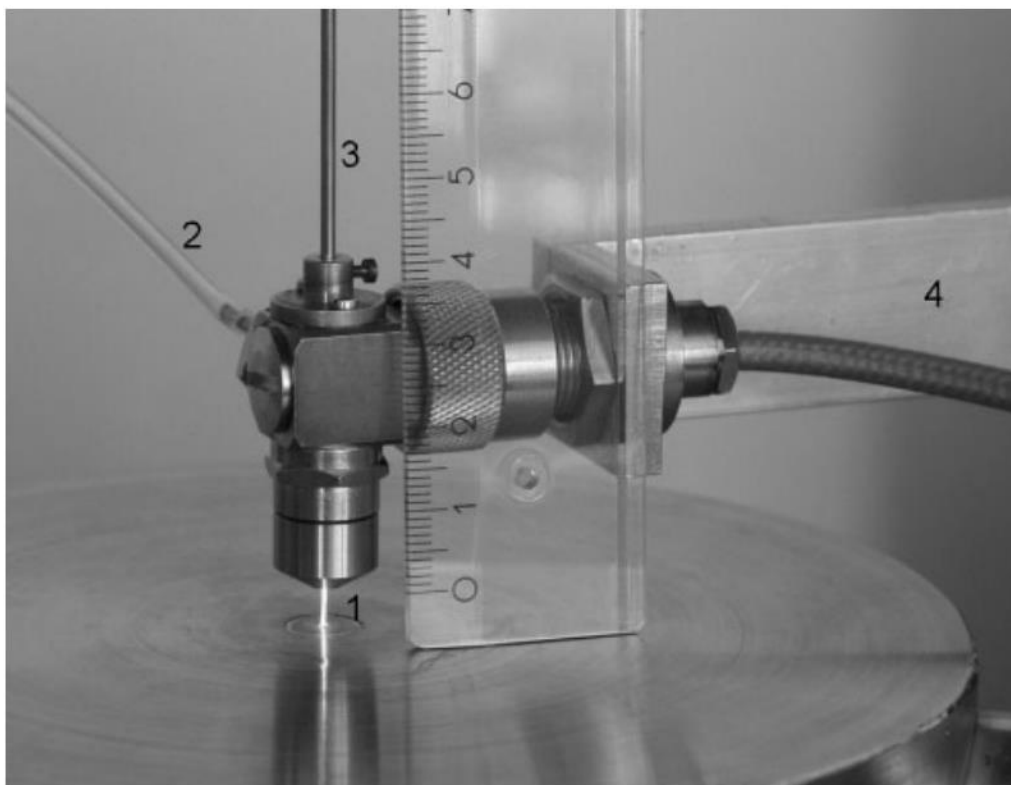
Obrázek 23: Schéma APGD-t a reálná aplikace.



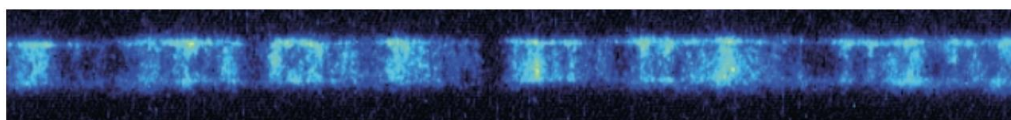
Obrázek 24: a) zapálená tryska, b) ošetřená oblast.



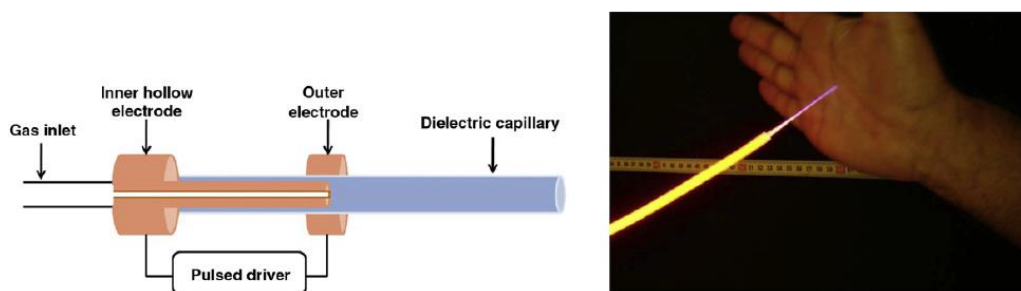
Obrázek 25: Schematický pohled na systém plazmového hořáku a plazmatu:
 a) plazmový hořák, b) torch's cylinder, c) plazma mezi elektrodami a válcem,
 d) pohled z boku.



Obrázek 26: 1 Plasma jet, 2 a 3 přívody plynů, 4 the microwave to the plasma source.



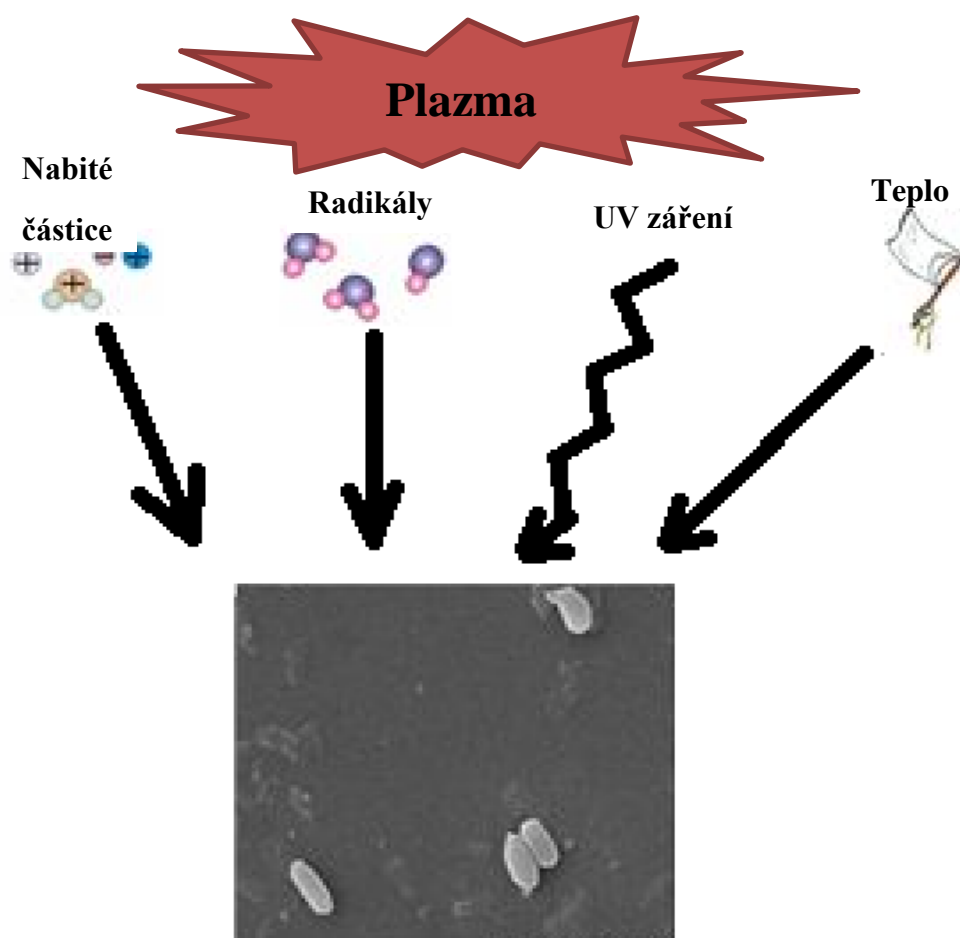
Obrázek 27: Dielectric barrier discharges 400 ns expozice.



Obrázek 28: Plazma gun: schéma a aplikace 50 cm délka.

4 Environmentální aplikace

Mezi významné aplikace využívajících plazmatu patří odstraňování chemikálií a biologických kontaminantů z různých materiálů, například z odpadních vod a z ovzduší. Plazma tak nalézá uplatnění například v oblasti čištění a sterilizace. Je to především díky tomu, že je schopno na bakterie synergicky působit hned několika svými produkty a to nabitými částicemi, reaktivními radikály, UV zářením, které vzniká ve výboji, a teplem viz obrázek 27.

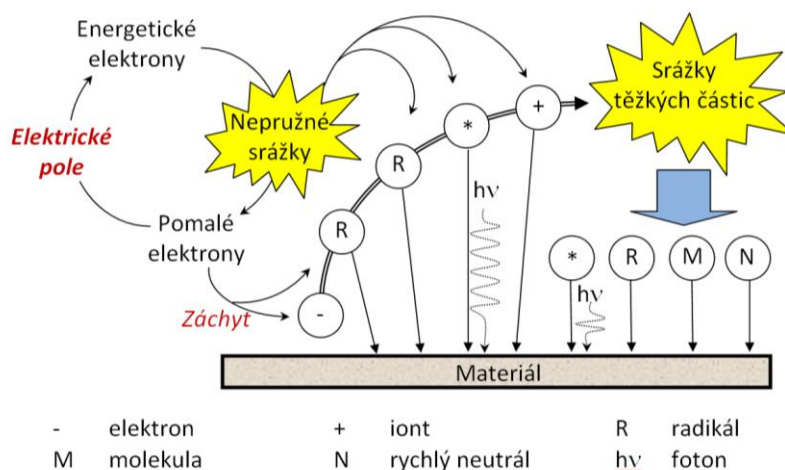


Obrázek 29: Plazmová sterilizace převzato a upraveno z prezentace O. Kyliana.

V dnešní době se chemikálie, hormony a jiné odpadní složky hromadí v životním prostředí v takové míře, že i přes naše snahy je odstranit, pronikají do potravin, vody a ovzduší. K jejich odstraňování bohužel používáme velmi často neefektivní a pro životní prostředí ne zrovna příliš šetrný způsob. Proto je snaha vyvinout nové a efektivní způsoby čištění, které budou samy o sobě šetrné k životnímu prostředí. Zde se jeví právě velký potenciál pro využití plazmatu.

4.1 Základní principy

Ačkoliv se může na první pohled zdát, že čištění tekutin a sterilizace (případně rozklad biologických materiálů) budou založeny na odlišných principech, není tomu tak. V plazmatu vzniká široké spektrum reaktivních částic, které pronikají k povrchu, případně do tekutiny, kde následně reagují. Schematicky je tento proces znázorněn na obrázku 28.



Obrázek 30: Schematické znázornění vzniku reaktivních částic v plazmatu a jejich interakce s elektricky záporně nabitým povrchem. Překresleno a upraveno z [55].

Z celé řady ukázek můžeme uvést například odstraňování hormonů či antibiotik z vody, sterilizaci chirurgických nástrojů nebo sterilizaci potravin. Prakticky ve všech případech používáme pro tento účel výboj za atmosférického tlaku, s nízkou teplotou reagujících částic. Zde je klíčovým faktorem především konstrukční hledisko takových čistících zařízení a náklady na jejich provoz. Zařízení pracující za sníženého tlaku by výrazně zatížila životní prostředí z pohledu energetické náročnosti technologie. Proto je atmosférický nízkoteplotní výboj prakticky jedinou možnou volbou, kterou lze v této oblasti použít.

Využití vyššího tlaku pracovního plynu s sebou nese samozřejmě řadu výhod i nevýhod. Za vyššího tlaku můžeme zpravidla snáze generovat větší počet reaktivních částic, čímž se zvyšuje pravděpodobnost reakce. S tlakem však roste srážková frekvence reaktivních částic s částicemi na pozadí, v důsledku čehož klesá tzv. difúzní koeficient a s tím také schopnost těchto částic „unikat“ z plazmatu a interagovat s chemickou sloučeninou. Nalezení optimální volby parametrů pro konkrétní případ je jedním z důvodů pro využití počítačového modelování těchto jevů.

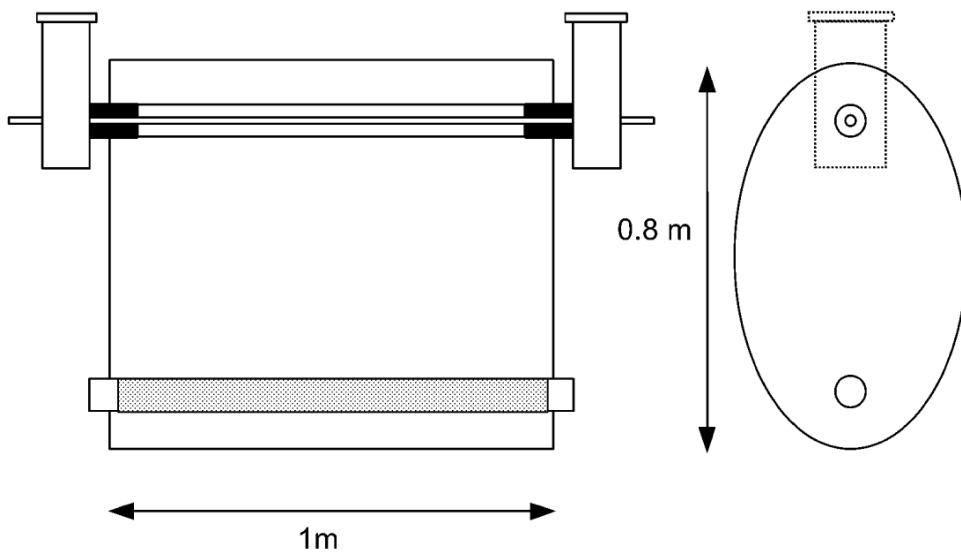
4.2 Ukázky vybraných aplikací

Pro účely této diplomové práce jsem zvolil tři oblasti, kde je možné cíleně využít plazmatu – čištění vzduchu, vody a aplikace ke sterilizaci potravin.

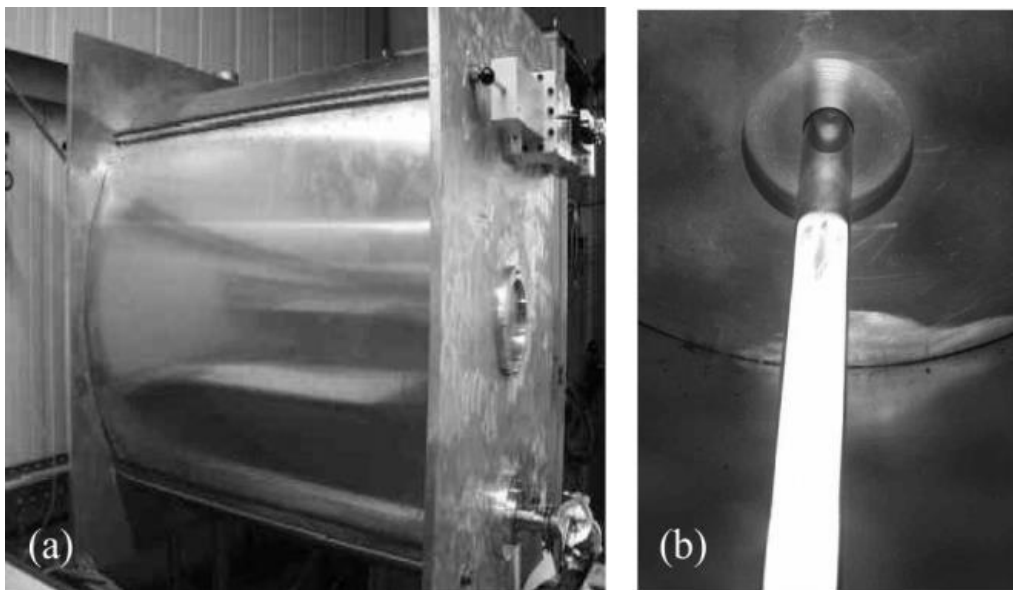
4.2.1 Plazmatické čištění vzduchu

Součástí přírody asi není složka, která by na nás měla tak velký vliv jako je právě vzduch a ovzduší kolem nás. Je nezbytný k našemu přežití, jeho kvalita ovlivňuje naši výkonnost a plní v našich životech nespočet dalších funkcí. Není asi tedy moc překvapivé, že právě na vývoj zařízení pro čištění vzduchu a odbourávání škodlivin z něj, se zaměřuje pozornost řady vědeckých týmů.

Slibnou možností, jak dosáhnout čistějšího ovzduší je „prevence“ [42]. To znamená, že plazma zde nečistí vzduch v klasickém objemu, ale čistící zařízení je osazeno blízko zdroje vzniku znečištění. Čištění těchto odpadních plynů je realizováno ještě před vypuštěním do okolního ovzduší, kdy je koncentrace škodlivin vysoká a objem čistého plynu je relativně malý. Celý proces je tak výrazně efektivnější, než by tomu bylo například při čištění vzduchu v místnosti. Pro realizaci čištění ovzduší, pro malé a střední firmy, pracující s rozpouštědly se používá mikrovlnný zdroj pro emitování bariérového výboje. Odpadní plyny jsou díky reaktivním částicím neutralizovány a obsah škodlivin výrazně redukován.



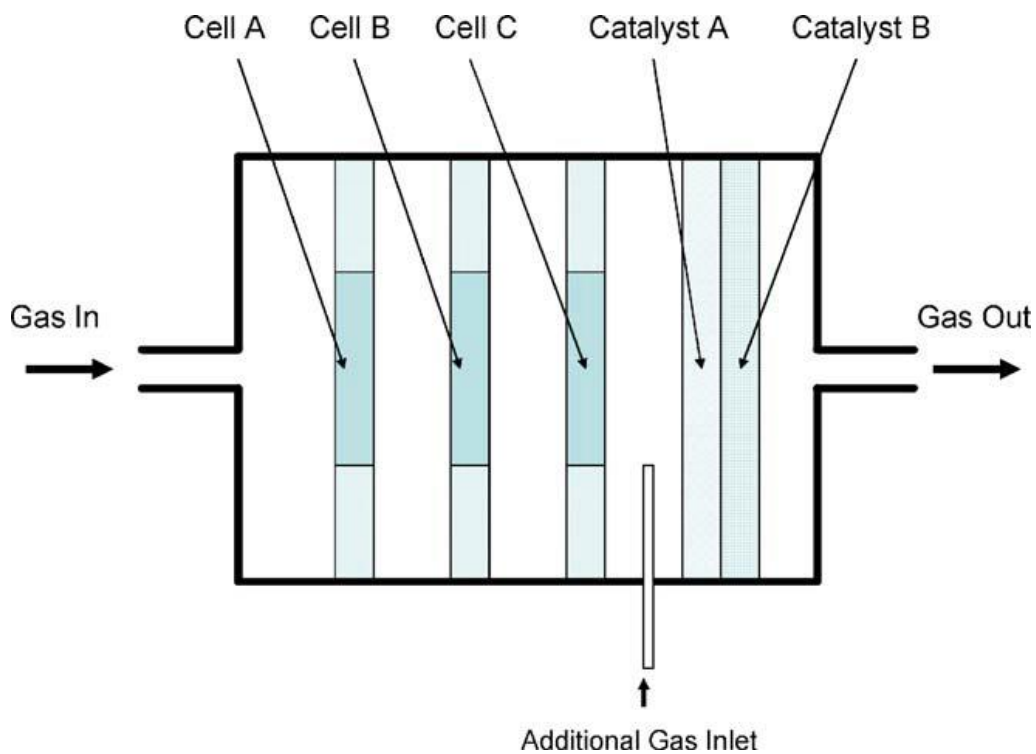
Obrázek 31: Schematický pohled na eliptický sud s lineárním prodloužením. V horním řádku je zaostření mikrovlnné antény, dolní linie ukazuje pozici plazmové trubice [42].



Obrázek 32: (a) Fotografie experimentální sestavy s mikrovlnným zdrojem spojený v horní části, a vakuum konektor na spodní části přední stěny s oknem mezi nimi. (b) Argonové plazma v atmosférickém tlaku, generované pulsním mikrovlnným zdrojem o výkonu 2,8 kW při průtoku 6,7 SLM [42].

Abychom dosáhli co nejlepších výsledků, můžeme toto základní zařízení modifikovat ještě pomocí aktivních komponent viz [43]. Tyto komponenty mohou být vyrobeny z fotokatalických a feroelektrických materiálů, které se také úspěšně podílejí na odbourávání znečišťujících látek z ovzduší. Vedlejším efektem je i snížení energetické náročnosti na taková zařízení.

Ještě lepších výsledků bylo dosaženo v rámci práce [44] použitím hybridních postupů, kdy se kombinuje účinek plazmatu s katalyzátory. Katalyzátorů máme několik druhů, všechny však směřují ke stejnému cíli, a to k odbourání co největšího množství toluenu a cyklohexanu v ovzduší. Tyto znečišťující plyny totiž velmi škodlivě reagují s ozónem a zeslabují jeho vrstvu. Bylo prokázáno, že při nízké koncentraci škodlivin, lze kombinací plazmového výboje a katalyzátorů dosáhnout až úplného zničení těchto škodlivin.



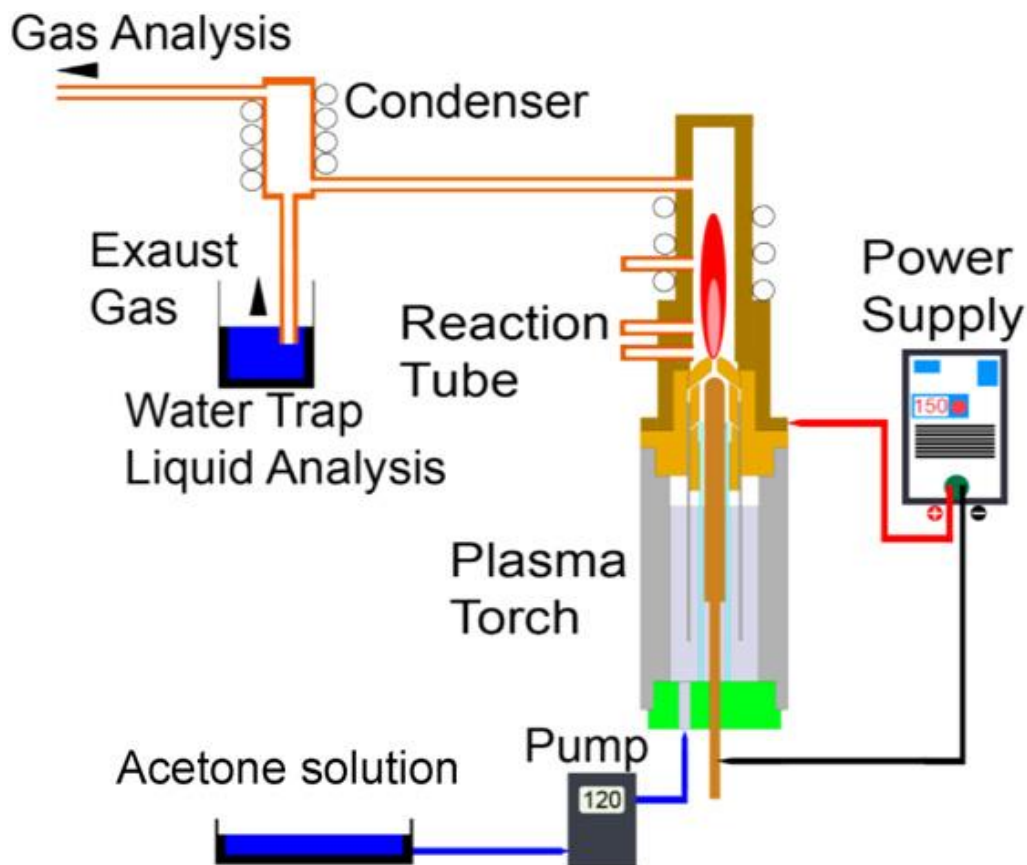
Obrázek 33: Schéma čističe [44].

4.2.2 Plazmatické čištění vody

Voda, jako kolébka života, jako základní součást většiny našich potravin a jako významná komponenta lidského těla, je součástí přírody a životního prostředí d výrazným dopadem na náš život. Proto je důležité zachovat její kvalitu a čistotu, aby tu po nás zůstala i pro další generace.

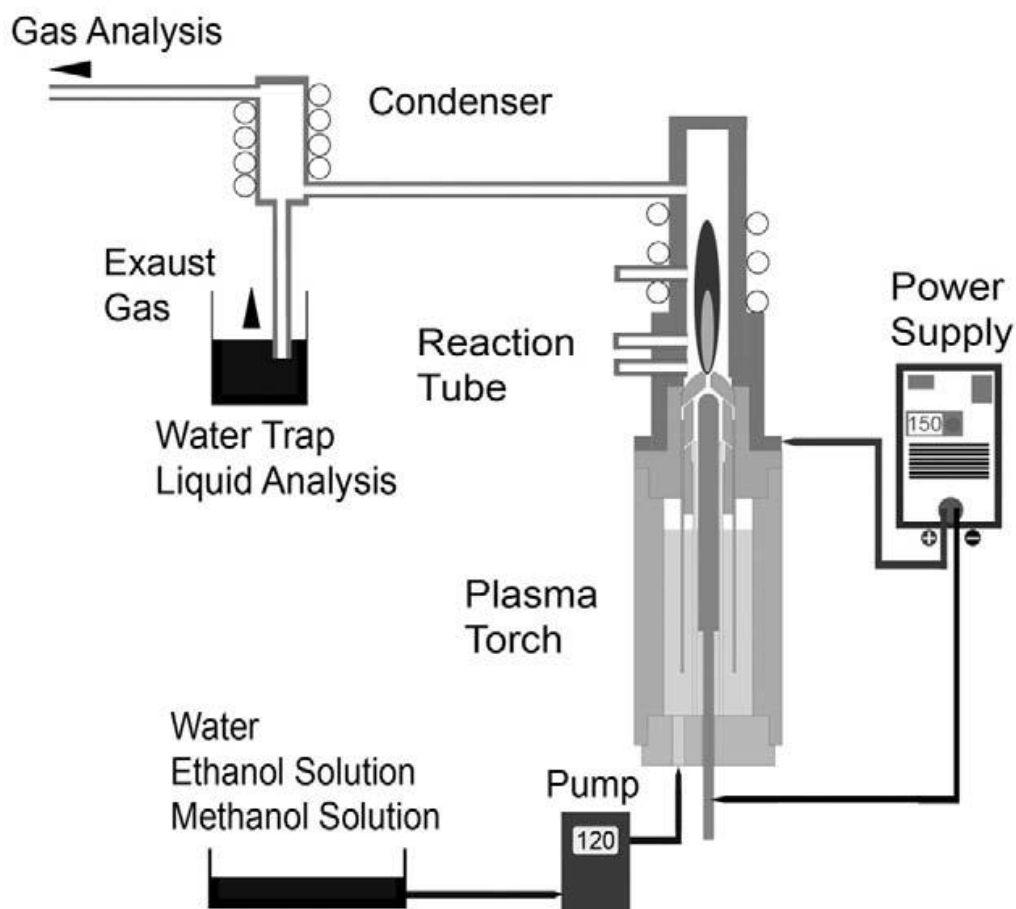
Jeden směr, kterým se plazmové čištění tekutin zabývá, je odstraňování uhlovodíků a jejich derivátů.

Odstraňováním acetonu se například zabývá práce [45]. Ten se rozkládá pomocí plazmového hořáku se stejnosměrným proudem za atmosférického tlaku. Tento hořák může generovat plazma s vodou bez potřeby dalších plynů, nebo chladících zařízení. Hlavními výstupními produkty jsou H_2 (60–70 %), CO_2 (5–16 %), CO (6–16 %) a CH_4 (0.2–0.9 %). Ve výstupním plynu bylo objeveno i stopové množství kyseliny mravenčí a formaldehydu.



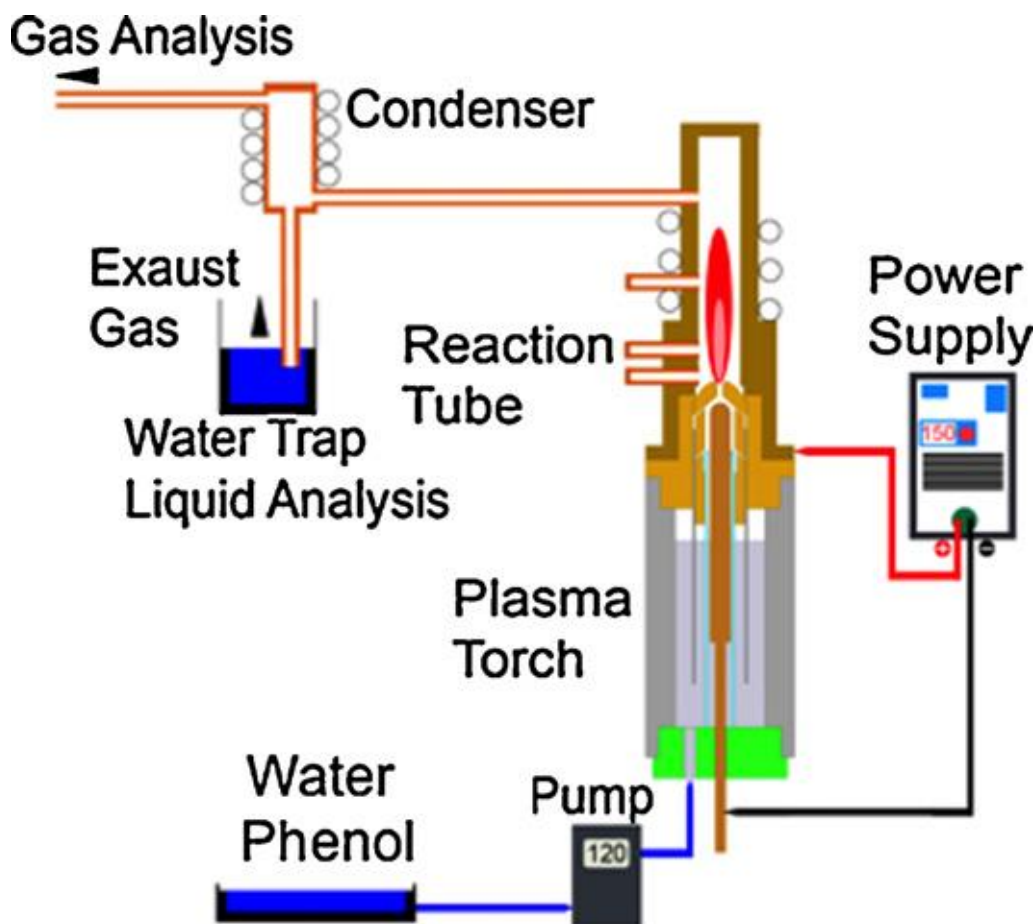
Obrázek 34: Schéma systému vodního plazmového rozkladu VOC [45].

Často jsou ve vodě nacházeny živočišné sloučeniny. Metanol a etanol jsou v tomto případě uhlovodíky, které nám pomáhají se zbavovat tohoto živočišného znečištění [46]. Plazmový hořák zde plní úlohu generátoru 100% páry, bez potřeby dalších parních generátorů. Do této páry je přidáván právě etanol a metanol pro jejich schopnost rozpouštět živočišné sloučeniny. Výstupními plyny jsou zde H_2 , CO a CO_2 . Výsledky ukazují, že až 50% uhlíku bylo tímto procesem přeměněno do pevného skupenství rozpuštěného v 5 % roztoku etanolu. V případě použití metanolu však byla přeměna uhlíku zanedbatelná.



Obrázek 35: Schéma použité aparatury [46].

Fenol je jedním z dalších derivátů uhlovodíků, který zhoršuje kvalitu vody a je třeba jeho obsah ve vodě redukovat. Mechanismus rozkladu fenolu o vysoké koncentraci ve vodě je založen na aplikaci různých obloukových výbojů. Výzkum popsáný v práci [47] ukázal, že účinnost odstranění celkového organického uhlíku a chemická spotřeba kyslíku se zvyšuje s nárůstem obloukového proudu. Koncentrace se snížila po aplikaci z $52,8 \text{ g.L}^{-1}$ na $1,0 \times 10^{-5} \text{ g.L}^{-1}$ při proudu 8 A s výtěžností $8,12 \text{ g.kWh}^{-1}$. Hlavními výstupními sloučeninami jsou H_2 , CO_2 , CO a CH_4 . Nicméně při nízkých proudech oblouku se zde vyskytly stopové prvky benzenu a cyklopentdienu ve formě plynu a v odtokové kapalině byly též stopové prvky formaldehydu a kyseliny mravenčí.

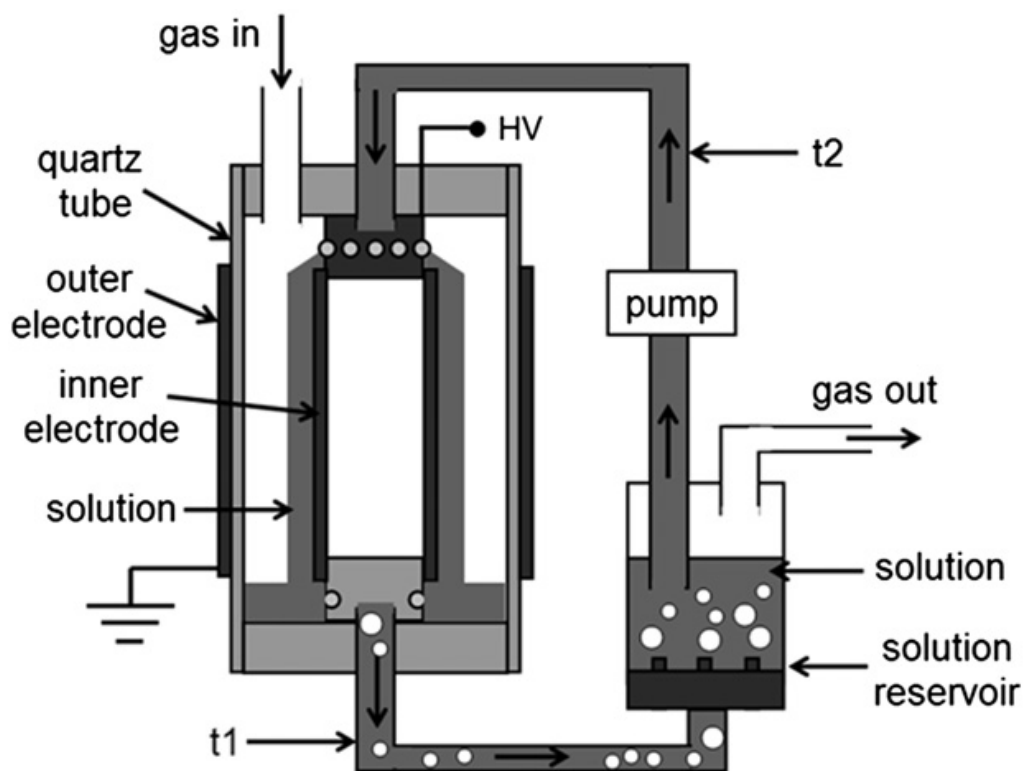


Obrázek 36: Schéma použité aparatury [47].

Mimo uhlovodíků a jejich derivátů je velký problém i se zbytky léčiv, jako jsou antibiotika a různá další farmaka. Při dlouhodobém užívání (a to jak v podobě léčiva, tak i nepřímo jako látky rozpuštěné ve vodě) si na ně tělo zvykne a už nemají léčebné účinky, proto je třeba z vody průběžně odstraňovat.

Jak již bylo uvedeno, tak obsah antibiotik ve vodě může vést k rezistivitě na ně. Amoxicilin, oxacilin a ampicilin patří mezi nejpoužívanější antibiotika z hlediska klasické léčby nemocí a tudíž i v odpadních vodách zaujímají nejvýznamnější koncentrace [48]. Jejich odbourávání je realizováno pomocí dielektrického bariérového výboje v koaxiální konfiguraci. Roztok

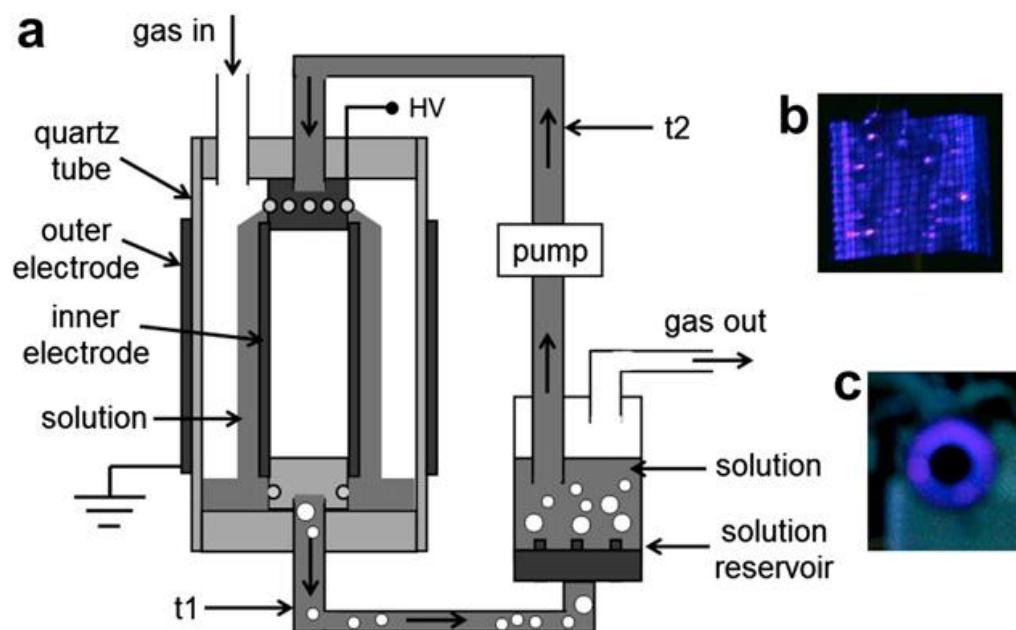
o koncentraci 100 mg/l stékal po vnitřní elektrodě plazmového reaktoru, takže výboj byl generován na rozhraní kapalně a plynné fáze. Samotný pulzní výboj byl generován při pokojové teplotě, atmosférickém tlaku a v kyslíku. Amoxicilin byl degradován po 10 minutách, zatímco další dvě antibiotika vyžadovala asi 30 minut pro svůj rozklad.



Obrázek 37: Experimentální sestava: plazma reaktoru a nádrž s roztokem [48].

Mimo antibiotik jsou současnými metodami těžko odbouratelné i léky obsahující pentoxifylin [49]. Tato látka byla opět ozařována pomocí dielektrického bariérového výboje v koaxiální konfiguraci, za pokojové teploty a atmosférického tlaku. I zde roztok stékal po vnitřní elektrodě a opět byl výboj generován na rozhraní plyn-kapalina. Kyslík byl zaveden s průtokem 600 sccm. Po 60 minutách klesla koncentrace pentoxifylinu o 92,5% své původní hodnoty. Tomu odpovídá výtěžek 16 g/kWh. Z výzkumu vyplývá, že

rychlost čištění závisí na počáteční koncentraci. Čím nižší je koncentrace tím rychleji dojde vyčištění. Vyšší efektivitu by mohlo být také dosaženo vyšší frekvencí pulzních výbojů. Samotný výkon aparatury nehrál tak velkou roli a jeho změny nepřinesly zásadní rozdíly ve výsledcích. Výzkum tedy prokázal, že nejrychlejší odbourávání nastává v prvních 30 minutách, aby bylo dosaženo téměř úplného odbourání, musí čištění probíhat až 120 minut.

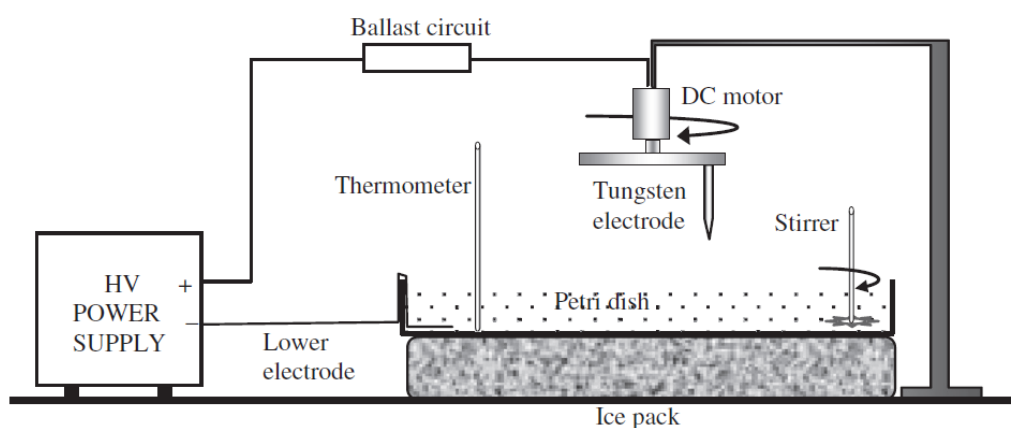


Obrázek 38: a) testovací soustava b) vláknitý charakter plazmatu c) pohled shora [49].

4.2.3 Sterilizace potravin

Dalším velmi podstatným faktorem ovlivňujícím člověka a jeho zdraví je kvalita potravin. Suroviny, ze kterých se potraviny vyrábějí, mají v normálním prostředí tendenci rychle stárnout. Proto je důležité tyto suroviny sterilizovat, především pro možnost jejich dlouhodobého skladování a zachování jejich nutriční hodnoty. I k tomu využíváme plazma.

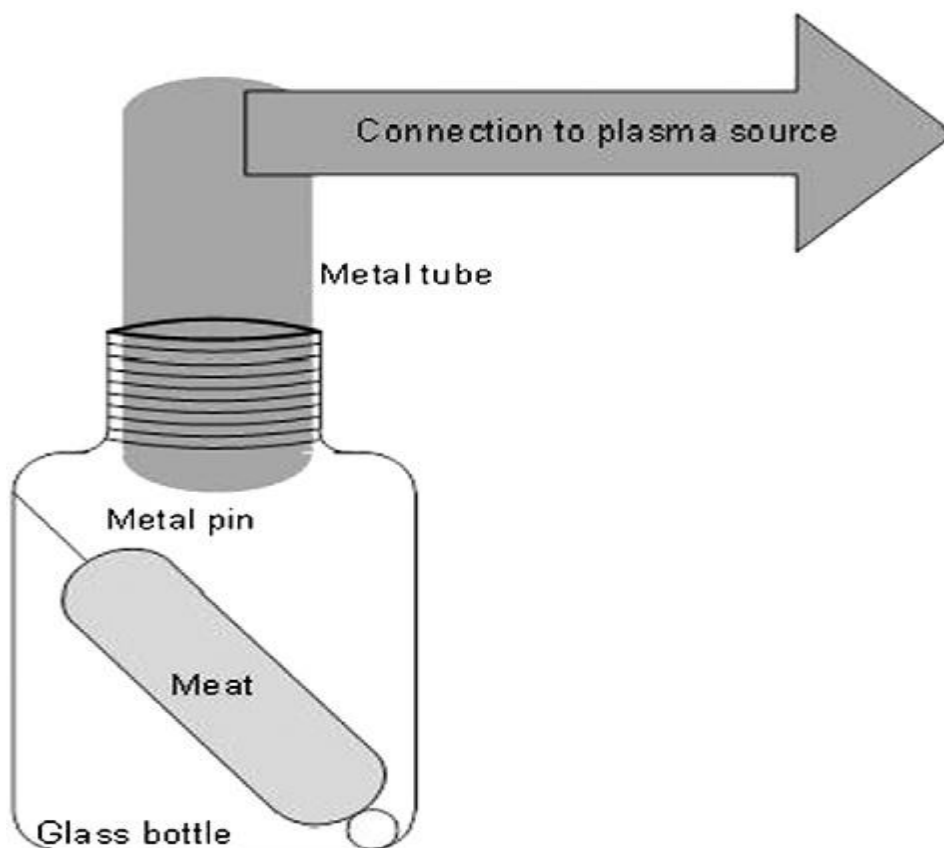
Jednou z rychle se kazících potravin je mléko. Problém s odstraněním bakterií v mléce existuje celá desetiletí [50]. Nejčastěji je řešen pomocí tepelného zpracování, které má však za následek chemické narušení mléka. Plazma nabízí způsob jak zneškodnit například nebezpečné kmeny bakterie *Escherichia coli* a přitom neovlivnit mléko tepelně natolik, aby došlo k jeho znehodnocení. Plazma bylo aplikováno na mléko s různým obsahem tuku v intervalech 3, 6, 9, 12, 15 a 20 min. Už po 3 minutách bylo pozorováno snížení počtu bakterií o 54% bez ohledu na obsah tuku v mléce. Po aplikaci plazmatu nebyla zaznamenána žádná změna v barvě nebo kyselosti mléka. Výsledky ukazují, že toto ošetření plazmatem bylo schopno zredukovat množství bakterie *Escherichia coli* trojnásobně.



Obrázek 39: Schéma experimentální sestavy [50].

Nepřímé aplikace plazmatu se využívá také k mikrobiologické sterilizaci vepřového masa. Výzkum publikovaný v práci [51], zjišťoval vliv ošetření plazmatem na barvu, pH, fluorescence, a odrazivost. Ošetření probíhá prostřednictvím mikrovlnného plazmatu s parametry 2.45 GHz, 1,2 kW, procesní plyn: vzduch v intervalech 2 x 2,5 min nebo 5 x 2 minuty. U prvního postupu bylo pozorováno lepší zachování barvy i po 20 denním skladování. U druhého postupu tomu bylo naopak ve srovnání s neošetřenými vzorky.

Měření odrazivosti a fluorescence vykázaly odlišné hodnoty pro jednotlivé procedury. Tato metoda ukazuje možný směr, ale musí být ještě vylepšena. Především vylepšení odbourávání mikroorganismů a zároveň neovlivnění masa v takové míře, aby bylo dobře přijato spotřebiteli.



Obrázek 40: Schéma experimentální sestavy pro sterilizaci masa [51].

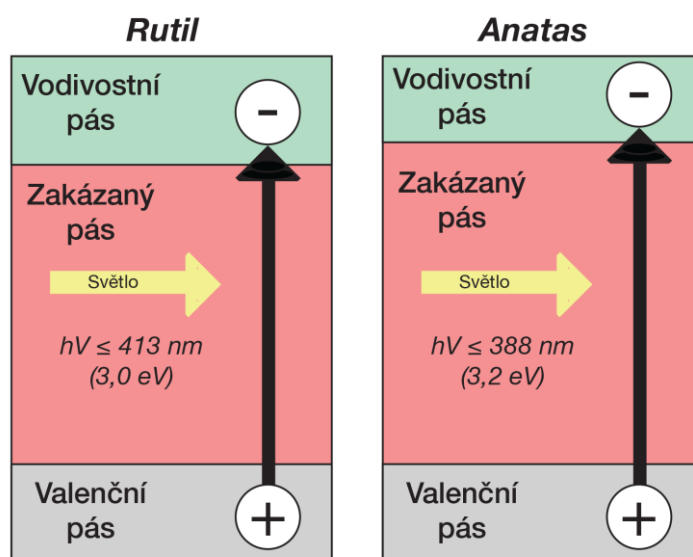
4.2.4 Další environmentální aplikace

Předchozí příklady pojednávaly o přímé aplikaci plazmatu na čištěné médium. Plazma umožňuje i nepřímé využití v podobě nanášení tenkých vrstev, které mají čistící účinek na principu fotokatalýzy, ta je definována v práci [52] následně.

Fotokatalýza je v současné době již široce využívaný proces, a to v mnoha komerčních i nekomerčních odvětvích jako je životní prostředí, energetika, samočištění povrchů, ovzduší i vodních zdrojů, sterilizace, fotoelektrochemické konverze a mnoho dalších.

Jedná se o proces, který má za úkol urychlení některých chemických reakcí působením vhodného katalyzátoru a záření. Chemickou katalýzou nazýváme změnu rychlosti chemické reakce mezi látkami. Předpona foto zde vyjadřuje působení světla během procesu. Pevné těleso absorbuje záření, na základě kterého dochází ke generování kladně nabitě díry a záporně nabitého elektronu (tzv. elektron-děrový pár). Záporně nabitý elektron umožňuje redukci, naopak na kladné díře dochází k účinné oxidaci. Nejpravděpodobnější reakcí je následně opětovné sloučení a degradace světelné energie na teplo, tzv. rekombinace.

Fotokatalytická reakce je tvořena celkem třemi fázemi. V první fázi dochází k absorbování fotonů pevnou látkou. Fotony jsou pevnou látkou pohlcovány a neprobíhá tedy žádná reakce. Za druhou fázi můžeme považovat utváření párů elektron-díra. Třetí a poslední fázi jsou již samotné reakce tvořené interakcí elektron děrových párů s okolní látkou. Dochází k vytvoření vysoce reaktivních radikálů. Tyto radikály spolu s ostatními částicemi plní stejnou funkci jako samotný plazmový výboj uváděný v předchozích aplikacích.



Obrázek 41: Energetický diagram pro TiO_2 a jejich elektrochemické potenciály [52].

Aplikace fotokatalyckého jevu se zaměřují především na vytváření aktivních povrchů pro účinné čištění životního prostředí od exhalací, škodlivých látek, patogenních mikroorganismů, alergenů a zápachů [56]. Typickými příklady jsou:

- nátěrové hmoty k vytváření vysoce účinných fotokatalytických povrchů.
- technologické postupy vytváření fotokatalytických povrchů.
- know-how využití fotokatalytických vlastností TiO_2 pro čištění vody a půdy a zamezení růstu nežádoucích mikroorganismů, plísní, řas, lišejníků a hub.

5 Počítačové modelování

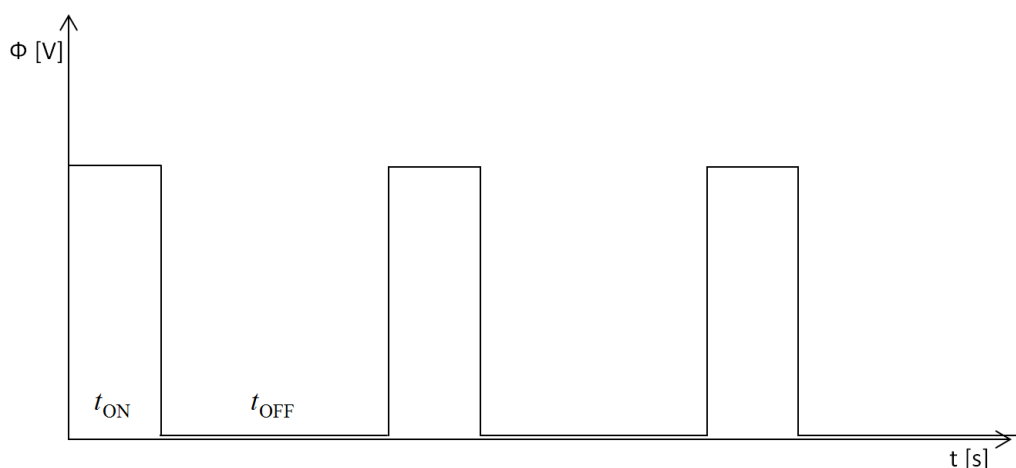
Počítačové modelování se v oblasti fyziky plazmatu, stejně jako v jiných oblastech fyziky a techniky, stalo poměrně častým prostředkem ke studování a predikci chování systémů. V následující kapitole bude navržen model, který

může být využit pro výpočet koncentrace různých druhů kyslíkových částic v závislosti na čase u pulzního výboje. Navržený model je koncipován jako 0D rozměrný, to znamená, že je uvažována pouze závislost fyzikálních veličin na čase. V modelu tedy není uvažován vliv difúze. Koncentrace částic se mění pouze v důsledku probíhajících chemických reakcí.

Dále je v modelu uvažován tzv. pulzní výboj, kdy jsou uvažovány pravidelně se opakující pulzy o době trvání t_{ON} , které jsou následovány obou t_{OFF} , kdy nabývá potenciál elektrického pole nulové hodnoty – viz obrázek 40.

Změnou hodnoty poměru $\frac{t_{\text{ON}}}{t_{\text{OFF}}}$ můžeme ovlivňovat depoziční parametry

celého procesu. V modelu se vychází z přiblížení, že intenzita elektrického pole v daném bodě je po dobu pulzu konstantní, mimo pulz nulová.



Obrázek 42: Ilustrativní závislost potenciálu elektrického pole na čase u pulzního výboje.

5.1 Popis počítačového modelu

Pro počítačové modelování ve fyzice plazmatu jsou používány nejčastěji dva modely. Jedny jsou založeny na popisu makroskopických veličin a jsou označovány jako modely spojitě. Druhou velkou skupinou jsou modely

částicové, které simulují plazma na základě sledování jednotlivých částic. Oba dva tyto postupy mají své výhody i nevýhody.

Výhodou spojitých modelů je jejich vysoká výpočetní rychlost, kdy výsledky můžeme získat během několika minut. Naopak jejich nevýhodou je komplikované (a často poměrně nepřesné) zavedení srážkových procesů, protože z makroskopického hlediska můžeme tyto procesy jen těžko popsat.

U částicových modelů je tomu naopak. Každou částici uvažujeme samostatně, můžeme tedy velmi dobře popsat její srážkové mechanismy. Přesně můžeme vypočítat také její polohu a rychlost. Problémem ale je, že v jednotce objemu se i při nízkém tlaku plynu nachází velké množství částic, což klade značné nároky na výpočetní čas.

Pro oblast biomedicíny a environmentálních aplikací je podstatnou složkou plynu kyslík, který je specifický tím, že jeho částice se mohou nacházet v celé řadě reaktivních stavů. V našem modelu se zaměřujeme pouze na nejvýznamnější z nich.

a) neutrální částice v základním stavu: O_2 , ozón O_3 a atomární kyslík O .

b) částice s elektrickým nábojem: e , O_2^+ , O^+ a O^- .

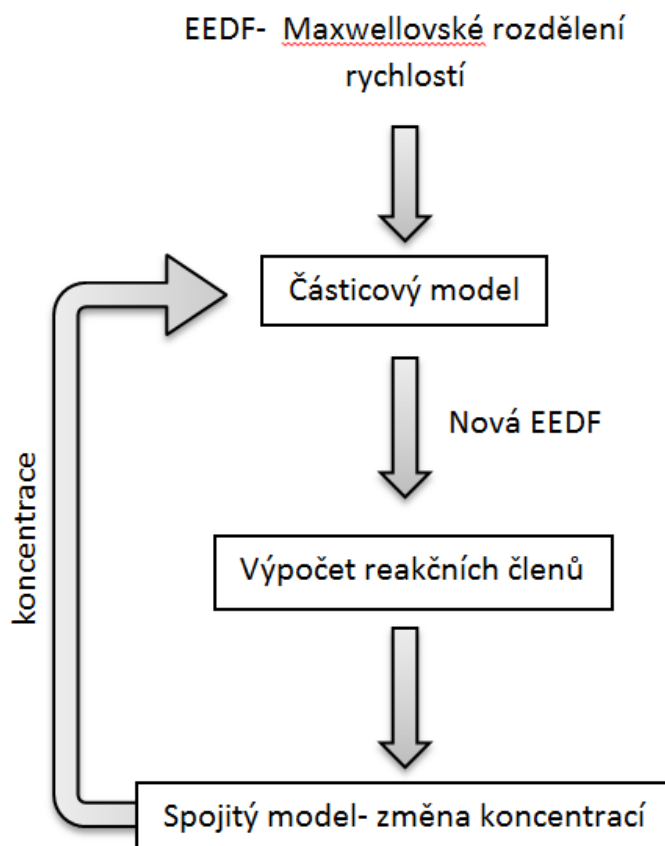
c) excitované molekuly kyslíku: $O_2(a)(a^1\Delta g)$ a $O_2(b)\left(b^1\sum g^+\right)$.

d) excitovaný atom kyslíku: $O(^1D)$.

S ohledem na energie jednotlivých stavů těchto částic jsou uvedené částice pro náš model nejvýznamnější. Pro uvedené typy částic je k dispozici dostatečné množství důvěryhodných experimentálních dat.

V praxi se tedy hledají postupy jak výhody obou postupů zachovat a zároveň způsob, jak co nejvíce eliminovat jejich nevýhody. Proto byly vyvinuty modely hybridní, u nichž srážky částic simulujeme pomocí částicového modelování a ostatní jevy popisujeme makroskopicky, tedy spojitými modely.

Navržený model je právě hybridního typu. Schematicky můžeme znázornit jednotlivé fáze výpočtu pomocí obrázku 41.

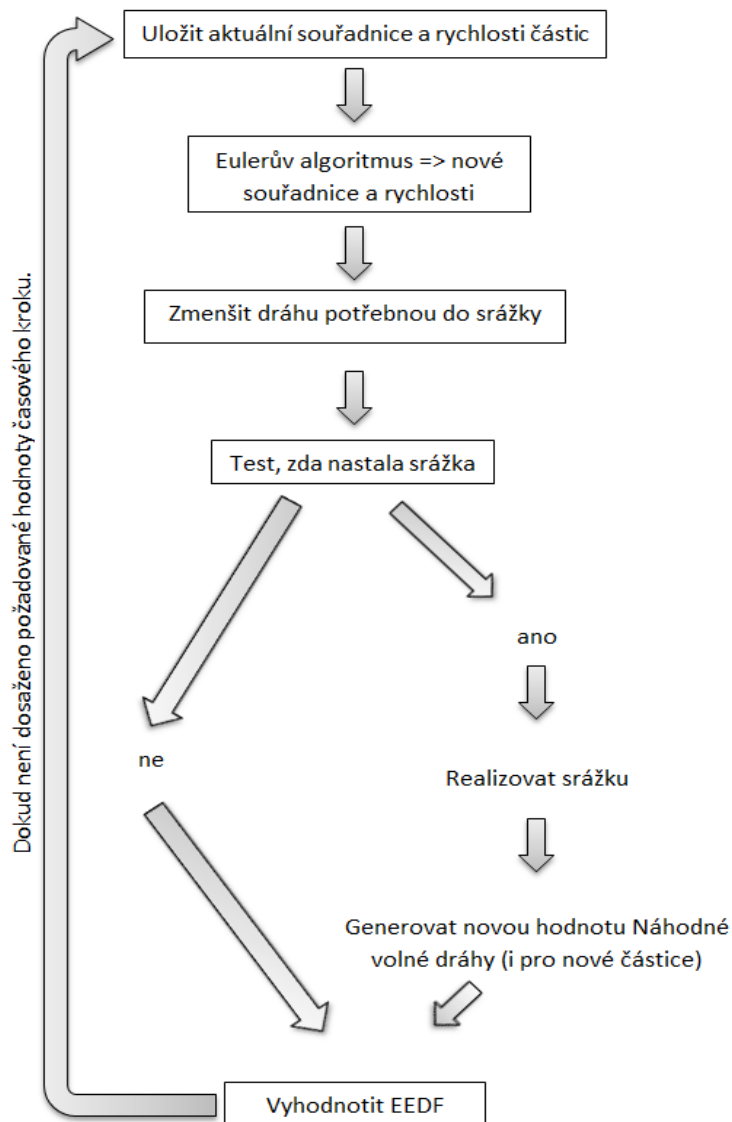


Obrázek 43: Základní schéma algoritmu.

V prvním kroku je řešen částicový model, jehož vstupem je maxwellovská pravděpodobnostní funkce rychlostí (vstupní předpoklad). Jejím výstupem je nová rozdělovací funkce, která již obecně maxwellovská není, neboť v důsledku srážek jednotlivých částic došlo k jejímu porušení.

Díky tomu, že známe novou rozdělovací funkci, můžeme provést upřesňující výpočet reakčních členů. Hodnoty, které získáme, nám poslouží jako vstup do třetí části algoritmu - spojitého modelu, pomocí kterého určíme koncentrace jednotlivých částic. Tyto hodnoty slouží jako vstup pro částicový model. Celý výpočet probíhá v cyklu po požadovanou dobu

5.2 Částicová část modelu



Obrázek 44: Schéma částicového algoritmu.

Částicový model nám slouží k tomu, abychom určili rozložení pravděpodobnosti rychlostí jednotlivých typů částic. Jejím vstupem jsou souřadnice a rychlosti jednotlivých částic. U každé částice je také informace o dráze, kterou musí částice urazit do okamžiku, kdy nastane srážka.

Algoritmus se skládá z několika kroků, které jsou schematicky znázorněné na obrázku 42:

- 1) Jsou uloženy aktuální souřadnice.
- 2) Pomocí Eulerova algoritmu přepočítaná nová poloha a určeny nové rychlosti jednotlivých částic:

$$\vec{r}_i^{k+1} = \vec{r}_i^k + \vec{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \vec{F}_i^k, \quad (1)$$

$$\vec{v}_i^{k+1} = \vec{v}_i^k + \frac{1}{2m_i} (\vec{F}_i^k) \Delta t, \quad (2)$$

$$\vec{F}_i^{k+1} = \dots \quad (3)$$

kde \vec{r} označuje polohový vektor částice, \vec{v} její rychlost, m hmotnost, \vec{F} působící sílu a Δt časový krok. Délka časového kroku se volí dle typu částice 1×10^{-11} s (elektrony) nebo 1×10^{-8} s (ionty a jiné těžší částice).

V tomto kroku můžeme samozřejmě zaměnit typ algoritmu dle požadované přesnosti za přesnější algoritmus Verletův nebo Leapfrog.

- 3) Dochází ke zmenšení dráhy potřebné k dosažení srážky o uraženou vzdálenost. Následuje test, zda srážka nastala. Pokud ano, tedy kdy byla uražena vzdálenost potřebná k dosažení srážky, je daná srážka realizována. Realizace proběhne pomocí metody Monte Carlo. Druhy uvažovaných srážek vyplývají z tabulky 1. Je rozehrána nová náhodná volná dráha dle vztahu vycházejícího z Poissonova rozdělení:

$$\lambda_{\text{rand}} = -\lambda_{\text{total}} \ln \gamma \quad (4)$$

kde ξ je náhodná volná dráha, λ střední volná dráha, γ je náhodné číslo s rovnoměrným rozdělením z intervalu $\gamma \in (0, 1)$.

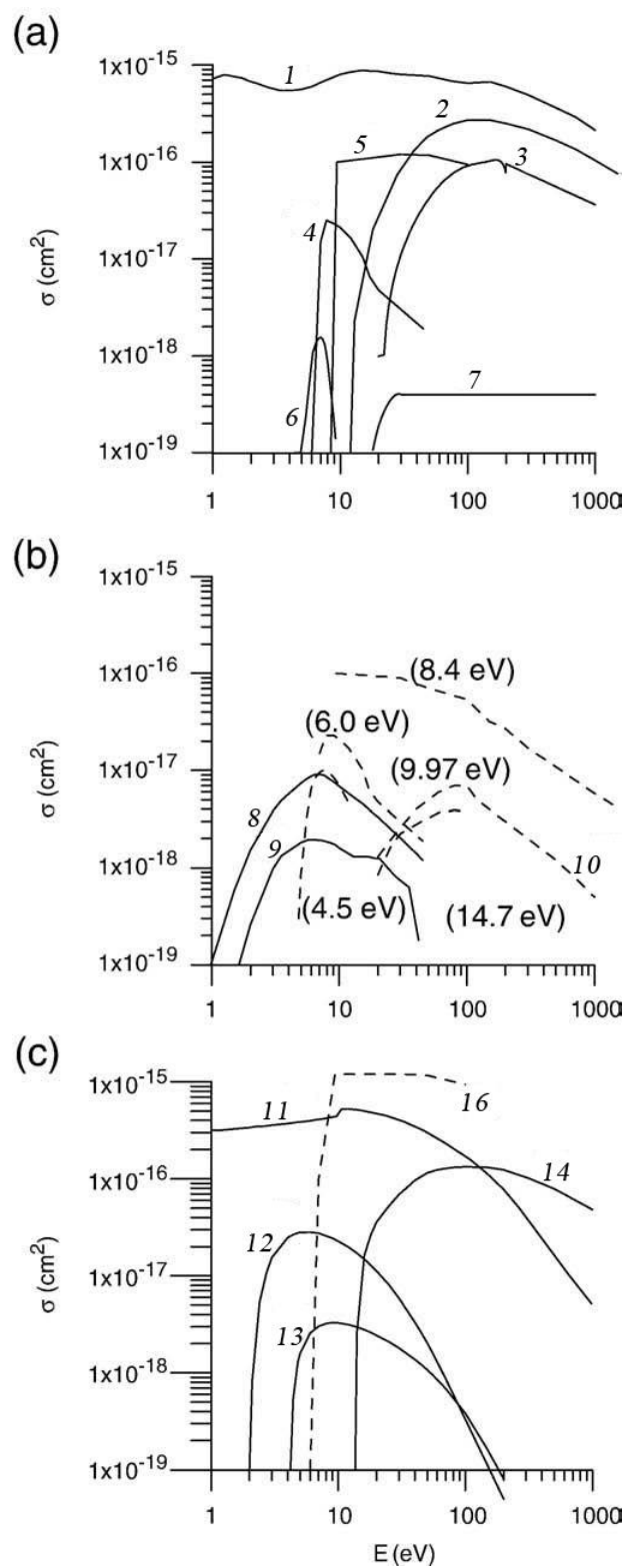
Vzhledem k tomu, že celkový účinný průřez pro elektrony není konstantní, ale je závislý na energii, je potřeba využít umělého obratu – tzv. „metody nulové srážky“. Jedná se o postup, kdy je přidána ještě jedna virtuální srážka, při které se nemění velikost ani směr rychlosti elektronu a jejíž účinný průřez je zvolen tak, aby celkový účinný průřez pro srážky elektronů byl konstantní (nezávislý na energii částic). Takto sestavená sada srážkových procesů a příslušných účinných průřezů nám umožní rozehrávat náhodnou volnou dráhu podle vztahu (4).

- 4) Vyhodnotíme získaná data, určíme rozdělovací funkci a částicový model může opět přejít k prvnímu kroku. Cyklus opakujeme tak dlouho, dokud nedosáhneme času, který jsme pro výpočet částicového modelu předem určili.

Velkou výhodou částicové části modelu je skutečnost, že zdrojový kód je možné paralelizovat. V reálu je pak možné provádět výpočet na několika výpočetních jednotkách zároveň, což vede k výrazné úspoře výpočetního času. V našem případě jsme pro tento účel využili výpočetních prostředků metacentra.

5.2.1 Účinné průřezy

Jak bylo uvedeno v úvodu kapitoly, mohou se kyslíkové částice nacházet v různých stavech. Pro každý typ těchto částic jsme zvolili nejčastější srážkové procesy, které jsou uvedeny v tabulce 1. Příslušné relační koeficienty k , jsou u všech částic uvažovány jako konstantní s výjimkou elektronů, kdy jsou zadány, jako funkce energie viz obrázek 43.



Obrázek 45: Účinné průřezy srážek elektronů jako funkce energie [20].

Tabulka 1: Přehled uvažovaných srážek vybraných typů částic a jejich účinné průřezy [20].

1	$e^- + O_2 \rightarrow e^- + O_2$	$\sigma(E)$
2	$e^- + O_2 \rightarrow 2e^- + O_2^+$	$\sigma(E)$
3	$e^- + O_2 \rightarrow 2e^- + O^+ + O$	$\sigma(E)$
4	$e^- + O_2 \rightarrow e^- + O(^3P) + O(^3P)$	$\sigma(E)$
5	$e^- + O_2 \rightarrow e^- + O(^3P) + O(^1D)$	$\sigma(E)$
6	$e^- + O_2 \rightarrow O^- + O$	$\sigma(E)$
7	$e^- + O_2 \rightarrow e^- + O^+ + O^-$	$\sigma(E)$
8	$e^- + O_2 \rightarrow e^- + O_2(a)$	$\sigma(E)$
9	$e^- + O_2 \rightarrow e^- + O_2(b)$	$\sigma(E)$
10	$e^- + O_2 \rightarrow e^- + O_2^*$	$\sigma(E)$
11	$e^- + O \rightarrow e^- + O$	$\sigma(E)$
12	$e^- + O \rightarrow e^- + O(^1D)$	$\sigma(E)$
13	$e^- + O \rightarrow e^- + O(^1S)$	$\sigma(E)$
14	$e^- + O \rightarrow 2e^- + O^+$	$\sigma(E)$
15	$e^- + O + M \rightarrow O^- + M$	$1 \times 10^{-43} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$
16	$e^- + O_3 \rightarrow e^- + O_2(X) + O(^3P)$	$\sigma(E)$
17	$e^- + O_3 \rightarrow O^- + O_2(X)$	$1 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
18	$e^- + e^- \rightarrow e^- + e^-$	$\sigma(E)$
19	$e^- + O^+ + M \rightarrow O + M$	$1 \times 10^{-38} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$
20	$e^- + O_2^+ \rightarrow O(^3P) + O(^3P)$	$9,53176 \times 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
21	$e^- + O_2^+ \rightarrow O(^3P) + O(^1D)$	$9,53176 \times 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
22	$e^- + O_2^+ + M \rightarrow O_2 + M$	$1 \times 10^{-38} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$
23	$e^- + O^- \rightarrow 2e^- + O$	$1,99953 \times 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

Reakce O⁺

24	$O^+ + O_2 \rightarrow O + O_2^+$	$2,1 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
25	$O^+ + O_2(a) \rightarrow O + O_2^+$	$2,1 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
26	$O^+ + O_2(b) \rightarrow O + O_2^+$	$2,1 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
27	$O^+ + O_3 \rightarrow O_2^+ + O_2$	$1 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
28	$O^+ + O + M \rightarrow O_2^+ + M$	$1 \times 10^{-41} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$
29	$O^+ + O^- \rightarrow O + O$	$2,7 \times 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

Reakce O₂⁺

30	$O_2^+ + O^- \rightarrow O_2 + O$	$2,1 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
31	$O_2^+ + O^- \rightarrow O + O + O$	$1,5 \times 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
32	$O_2^+ + O^- + M \rightarrow O_3 + M$	$2 \times 10^{-37} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$

Reakce O⁻

33	$O^- + O_2 \rightarrow e^- + O_3$	$5 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
34	$O^- + O_2(a) \rightarrow e^- + O_3$	$3 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
35	$O^- + O_2(b) \rightarrow e^- + O + O_2$	$6,9 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
36	$O^- + O \rightarrow e^- + O_2$	$3 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
29	$O^- + O^+ \rightarrow O + O$	$2,7 \times 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
30	$O_2^+ + O^- \rightarrow O_2 + O$	$1,5 \times 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
31	$O_2^+ + O^- \rightarrow O + O + O$	$2 \times 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
32	$O_2^+ + O^- + M \rightarrow O_3 + M$	$2 \times 10^{-37} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$

Reakce O₂(a)

37	$O_2(a) + O_2(X) \rightarrow 2O_2(X)$	$6 \times 10^{-22} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
38	$O_2(a) + O(^3P) \rightarrow O_2(X) + O(^3P)$	$7 \times 10^{-22} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
39	$O_2(a) + O_3 \rightarrow 2O_2(X) + O(^3P)$	$4,02422 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
40	$O_2(a) + O_3 \rightarrow O_2(X) + O_3$	$3,93429 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
41	$2O_2(a) \rightarrow O_2(b) + O_2(X)$	$1,85621 \times 10^{-24} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
42	$O_2(a) \rightarrow O_2(X) + h\nu$	$0,00037 \text{ s}^{-1}$

Reakce O₂(b)

43	$O_2(b) + O_2(X) \rightarrow O_2(a) + O_2(X)$	$1,92568 \times 10^{-28} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
44	$O_2(b) + O_2(X) \rightarrow 2O_2(X)$	$1 \times 10^{-22} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
45	$O_2(b) + O(^3P) \rightarrow O_2(X) + O(^1D)$	$2,8095 \times 10^{-23} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
46	$O_2(b) + O(^3P) \rightarrow O_2(a) + O(^3P)$	$8 \times 10^{-20} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
47	$O_2(b) + O_3 \rightarrow 2O_2(X) + O(^3P)$	$1,5 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
48	$O_2(b) \rightarrow O_2(X) + h\nu$	$0,14 \text{ s}^{-1}$

Reakce O(^3P)

49	$O(^3P) + 2O_2(X) \rightarrow O_3 + O_2(X)$	$5,83406 \times 10^{-46} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$
50	$2O(^3P) + O_2(X) \rightarrow O_3 + O(^3P)$	$6,44047 \times 10^{-46} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$
51	$2O(^3P) + O_2(X) \rightarrow 2O_2(X)$	$6,73876 \times 10^{-45} \text{ m}^6 \text{ s}^{-1}$
52	$O(^3P) + O_3 \rightarrow O_2(a) + O_2(X)$	$4,68176 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
53	$O(^3P) + O_3 \rightarrow 2O_2(X)$	$8,42716 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
54	$O(^3P) + O(^1D) \rightarrow 2O(^3P)$	$8 \times 10^{-18} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

Reakce O(^1D)

54	$O(^1D) + O(^3P) \rightarrow 2O(^3P)$	$8 \times 10^{-18} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
55	$O(^1D) + O_2(X) \rightarrow O(^3P) + O_2(X)$	$8,75166 \times 10^{-18} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
56	$O(^1D) + O_2(X) \rightarrow O(^3P) + O_2(a)$	$1 \times 10^{-18} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
57	$O(^1D) + O_2(X) \rightarrow O(^3P) + O_2(b)$	$3,20061 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

58	$O(^1D) + O_3 \rightarrow O(^3P) + O_3$	$2,4 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
59	$O(^1D) + O_3 \rightarrow 2O_2(X)$	$2,4 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
60	$O(^1D) + O_3 \rightarrow O(^3P) + O_2(X)$	$1,2 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
61	$O(^1D) + O_3 \rightarrow O_2(X) + O_2(a)$	$1,2 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

Reakce O_3

62	$O_3 + M \rightarrow O(^3P) + O_2(X) + M$	$2,29157 \times 10^{-32} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
39	$O_3 + O_2(a) \rightarrow 2O_2(X) + O(^3P)$	$4,02422 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
40	$O_3 + O_2(a) \rightarrow O_2(X) + O_3$	$3,93429 \times 10^{-} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
47	$O_2(b) + O_3 \rightarrow 2O_2(X) + O(^3P)$	$1,5 \times 10^{-17} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
52	$O(^3P) + O_3 \rightarrow O_2(a) + O_2(X)$	$4,68176 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
53	$O(^3P) + O_3 \rightarrow 2O_2(X)$	$8,42716 \times 10^{-21} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
59	$O(^1D) + O_3 \rightarrow 2O_2(X)$	$2,4 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
60	$O(^1D) + O_3 \rightarrow O(^3P) + O_2(X)$	$1,2 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
61	$O(^1D) + O_3 \rightarrow O_2(X) + O_2(a)$	$1,2 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

5.3 Výpočet reakčních koeficientů

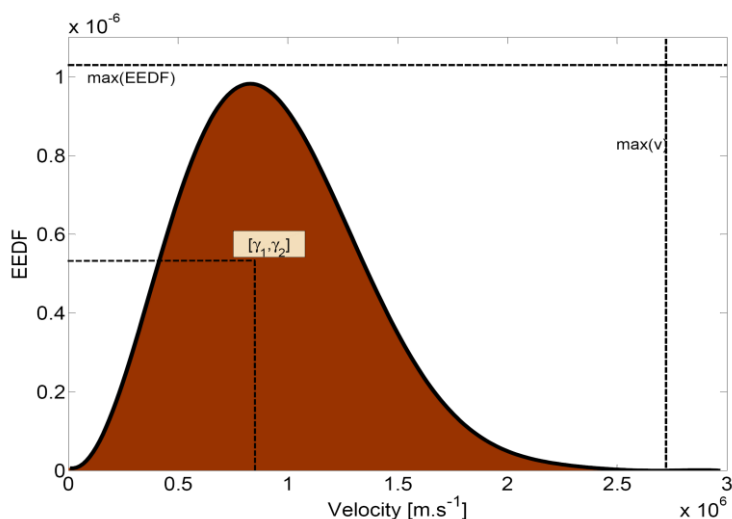
V této fázi výpočtu jsou na základě hustoty pravděpodobnosti f získané v předchozím kroku určovány koeficienty k . Principiálně tato část programu funguje tak, že generuje uspořádanou dvojici náhodných čísel s rovnoměrným rozdělením $[x,y]$, $x \in \langle 0, v_{\max} \rangle$, $y \in \langle 0, f_{\max} \rangle$, kde $v_{\max} = 5 \sqrt{\frac{2k_B T_e}{m_e}}$ a f_{\max} je maximální hodnota rozdělovací funkce f . Pak porovná hodnoty y s hodnotou $f(x)$ získanou interpolací. Pokud je

$$y \leq f(x) \quad (5)$$

vyhledá program hodnotu celkového účinného průřezu odpovídajících rychlosti $v = x$ a nakonec vypočítá dle vztahu

$$k = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \sigma_m v_m \quad (6)$$

hodnotu k . N ve vztahu značí počet dvojic $[v_m, y_m]$ splňujících podmínku 5.



Obrázek 44: K výpočtu reakčních koeficientů [53].

5.4 Spojitá část modelu

Matematický popis spojitě části modelu je založen na rovnicích chemické kinetiky. Koncentrace n_i (kde n značí koncentraci a i typ částice) daného typu částice v závislosti na čase t

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = R_i, \quad (6)$$

kde reakční koeficient R může být vyjádřen jako

$$R_i = \sum_m k_m n_A n_B + \sum_p k_p n_C n_D n_E + \sum_q k_q . \quad (7)$$

Součet na pravé straně je proveden přes všechny dvou, tří a dvou a tří částicové srážky. Odpovídající hodnoty k jsou brány z tabulky, případně jsou vypočítány v druhé fázi výpočtu. Výstupem spojitě části modelu jsou nové hodnoty koncentrací jednotlivých typů částic. Ty posléze vstupují jako vstupní parametr do částicového modelu.

5.5 Výpočetní realizace modelu

Navržený model byl využit ke studiu procesů v rámci projektu GAJU 102/2013/S – Advanced Oxidation Processes v ekologických aplikacích a využití těchto postupů v badatelské výuce učitelů. Zdrojové kódy jsou připraveny v programech MATLAB a COMSOL Multiphysics. Numerická realizace byla provedena za pomoci výpočetních prostředků Metacentra¹.

¹ <http://metavo.metacentrum.cz/> The access to computing and storage facilities owned by parties and projects contributing to the National Grid Infrastructure MetaCentrum, provided under the programme "Projects of Large Infrastructure for Research, Development, and Innovations" (LM2010005) is highly acknowledged.

6 Závěr

V teoretické části předložené diplomové práce byly prezentovány vybrané aplikace plazmových výbojů se zvláštním ohledem na některé biomedicínské a environmentální aplikace. Tyto vybrané aplikace byly stručně popsány a byly nastíněny možnosti jejich budoucího rozvoje.

V praktické části byl navržen hybridní počítačový model pulzního plazmatického výboje, s jehož pomocí je možno efektivně vypočítat koncentrace různých druhů kyslíkových částic v tomto výboji. Data získaná řešením tohoto modelu jsou připravena k opublikování v rámci projektu GAJU 102/2013/S.

7 Reference

- [1] Co je to plazma?. UFA AVČR. Ústav fyziky atmosféry AV ČR, v.v.i. Akademie věd ČR [online]. 2013 [cit. 2013-07-12]. Dostupné z: <http://www.ufa.cas.cz/html/climaero/topics/iono/definice.html>
- [2] INFORMAČNÍ SYSTÉM MASARYKOVY UNIVERSITY. Archiv závěrečné práce Marcela Lišková PřF N-CH ORGA, UCH: Syntézy za neklasických podmínek - plasmochemie [online]. 2008. vyd. 2008 [cit. 2013-07-22]. Dostupné z: http://is.muni.cz/th/77987/prif_m/plasmochemie.doc
- [3] HUDEČEK, Ing. Ondřej a Ing. Tomáš SEDLÁČEK PHD. Povrchové úpravy plastových výrobků plazmou. In: Plastikářský klastr [online]. 2010 [cit. 2013-07-22]. Dostupné z: http://www.plastr.cz/files/new35/144-Povrchove_upravy_plastovych_vyrobku_plazmou.pdf
- [4] th. von Woedtke at al., Plasmas for medicine, Physics Report (2013), <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2013.05.005>
- [5] Plasmatreat. Plasmatreat.com [online]. 2013 [cit. 2013-08-03]. Dostupné z: <http://www.plasmatreat.com/industrial-applications/new-energy-technologies.html>
- [6] Plasmatreat. Plasmatreat.com [online]. 2013 [cit. 2013-08-03]. Dostupné z: <http://www.plasmatreat.com/industrial-applications/plasma-treatment-packaging-industry.html>
- [7] KŘIVÁNKOVÁ, Dana. Využití plazmatu pro barvení textilních materiálů [online]. 2010 [cit. 2013-08-03]. Diplomová práce. Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta. Vedoucí práce Milan Alberti. Dostupné z: http://is.muni.cz/th/175416/prif_m/

- [8] STROJÍRENSTVÍ: strojírenství pro střední a vysoké školy. MAREK, Vlastimil. Něco v síti [online]. 2011 [cit. 2013-08-03]. Dostupné z: <http://strojirenstvi.studentske.cz/2008/10/svaovn-plazmou.html>
- [9] Plazmové sváření (navarování) -15. INNET | VŠB - Technická univerzita Ostrava [online]. 2009 [cit. 2013-08-03]. Dostupné z: <http://homen.vsb.cz/~hla80/2009Svarovani/2-01-15.pdf>
- [10] T Bell, Y Sun, A Suhadi, Environmental and technical aspects of plasma nitrocarburising, Vacuum, Volume 59, Issue 1, October 2000, Pages 14-23, ISSN 0042-207X
- [11] Thomas, M., Borris, J., Dohse, A., Eichler, M., Hinze, A., Lachmann, K., Nagel, K. and Klages, C.-P. (2012), Plasma Printing and Related Techniques – Patterning of Surfaces Using Microplasmas at Atmospheric Pressure. Plasma Processes Polym., 9: 1086–1103. doi: 10.1002/ppap.201200020
- [12] ŠÍRA, Martin. Vytváření tenkých vrstev a úprava povrchů ve výbojích za atmosférického tlaku [online]. 2009 [cit. 2013-08-03]. Disertační práce. Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta. Vedoucí práce David Trunec. Dostupné z: <http://is.muni.cz/th/13705/prif_d/>.
- [13] Plazma, polymery, nanostruktury. KOUSAL, Jaroslav. UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTA [online]. 2013 [cit. 2013-08-03]. Dostupné z: <http://www.mff.cuni.cz/verejnost/jdf/2013/kousal.pdf>
- [14] Indukční výbojky, tzv. plazmové světelné zdroje. PARMA, Mgr. Mikuláš. SVĚTLO časopis pro světlo a osvětlování [online]. 2013 [cit. 2013-08-03]. Dostupné z: http://www.odbornecasopisy.cz/index.php?id_document=44766

- [15] Plazma všude kolem nás. KULHÁNEK, Petr a Frederik VELINSKÝ. ČRO SEVER. Český rozhlas [online]. 2011 [cit. 2013-08-03]. Dostupné z: http://www.rozhlas.cz/planetarium/ost_vedy/zprava/945443
- [16] R. Suchentrunk, G. Staudigl, D. Jonke, H.J. Fuesser, Industrial applications for plasma processes—examples and trends, *Surface and Coatings Technology*, Volume 97, Issues 1–3, December 1997, Pages 1-9
- [17] US Environmental Protection Agency National ambient air quality standards for ozone doc no: E8-5645, *Fed. Regist.* 73 (60) (2008) 16436–16514
- [18] US Environmental Protection Agency Primary national ambient air quality standards for nitrogen dioxide, *Fed. Regist.* 75 (26) (2008) 6474.
- [19] ICNIRP Guidelines on UV radiation exposure limits, *Health Phys.* 71 (6) (1996) 978.
- [20] Annemie Bogaerts, Effects of oxygen addition to argon glow discharges: A hybrid Monte Carlo-fluid modeling investigation, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, Volume 64, Issues 11–12, November–December 2009, Pages 1266-1279
- [21] ICNIRP Guidelines for limiting exposure to time-varying electric, magnetic and electromagnetic fields (up to 300 GHz), *Health Phys.* 74 (4) (1998) 494–522.
- [22] J. Heinlin, G. Isbary, W. Stolz, G. Morfill, M. Landthaler, T. Shimizu, B. Steffes, T. Nosenko, J. Zimmermann, S. Karrer, Plasma applications in medicine with a special focus on dermatology, *J. Eur. Acad. Dermatol. Venereol.* 25 (1) (2011) 1–11.

- [23] J. Heinlin, G. Morfill, M. Landthaler, W. Stolz, G. Isbary, J. Zimmermann, T. Shimizu, S. Karrer, Plasma medicine: possible applications in dermatology, *J. Dtsch. Dermatol. Ges.* 8 (2010) 968–976.
- [24] K. Becker, A. Koutsospyros, S.M. Yin, C. Christodoulatos, N. Abramzon, J.C. Joaquin, G. Brelles-Mario, Environmental and biological applications of microplasmas, *Plasma Phys. Controlled Fusion* 47 (12B) (2005) B513–B523.
- [25] R.E.J. Sladek, E. Stoffels, R. Walraven, P.J.A. Tielbeek, R.A. Koolhoven, Plasma treatment of dental cavities: a feasibility study, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 32 (4) (2004) 1540–1543.
- [26] R. Bussiahn, R. Brandenburg, T. Gerling, E. Kindel, H. Lange, N. Lembke, K.-D. Weltmann, T. von Woedtke, T. Kocher, The hairline plasma: an intermittent negative dc-corona discharge at atmospheric pressure for plasma medical applications, *Appl. Phys. Lett.* 96 (14) (2010) 143701.
- [27] A. Ritts, Q.Y.H. Li, C. Xu, X. Yao, L. Hong, Y. Wang, Dentin surface treatment using a non-thermal argon plasma brush for interfacial bonding improvement in composite restoration, *Eur. J. Oral Sci.* 118 (2010) 510–516.
- [28] M.S. Kim, I.G. Koo, M.Y. Choi, J.-C. Jung, F. Eldali, J.K. Lee, G.J. Collins, Correlated electrical and optical studies of hybrid argon gas–water plasmas and their application to tooth whitening, *Plasma Processes Polym.* 9 (3) (2012) 339–345.
- [29] R. Sladek, S. Filoche, C. Sissons, E. Stoffels, Treatment of *Streptococcus mutans* biofilms with a nonthermal atmospheric plasma, *Lett. Appl. Microbiol.* 45 (2007) 318–323.
- [30] E. Stoffels, A.J. Flikweert, W.W. Stoffels, G.M.W. Kroesen, Plasma needle: a non-destructive atmospheric plasma source for

- fine surface treatment of (bio)materials, *Plasma Sources Sci. Technol.* 11 (4) (2002) 383–388.
- [31] M. Laroussi, X. Lu, Room-temperature atmospheric pressure plasma plume for biomedical applications, *Appl. Phys. Lett.* 87 (11) (2005) 113902.
- [32] K.-D. Weltmann, E. Kindel, R. Brandenburg, C. Meyer, R. Bussiahn, C. Wilke, T. von Woedtke, Atmospheric pressure plasma jet for medical therapy: plasma parameters and risk estimation, *Contrib. Plasma Phys.* 49 (9) (2009) 631–640.
- [33] Better dental bond means fewer trips to the dentist. *Engineering missouri* [online]. 2012 [cit. 2013-08-09]. Dostupné z: <http://engineering.missouri.edu/2012/06/better-dental-bond-means-fewer-trips-to-the-dentist/>
- [34] New Plasma Brush Could Be a Painless Way to Fill Cavities. *Frisco-dentist-blog* [online]. 2012 [cit. 2013-08-09]. Dostupné z: <http://frisco-dentist-blog.com/2012/01/new-plasma-brush-could-be-a-painless-way-to-fill-cavities/>
- [35] G. Fridman, M. Peddinghaus, M. Balasubramanian, H. Ayan, A. Fridman, A. Gutsol, A. Brooks, Blood coagulation and living tissue sterilization by floating-electrode dielectric barrier discharge in air, *Plasma Chem. Plasma Process.* 26 (4) (2006) 425–442.
- [36] S. Coulombe, V. Leveille, S. Yonson, R.L. Leask, Miniature atmospheric pressure glow discharge torch (APGD-t) for local biomedical applications, *Pure Appl. Chem.* 78 (6) (2006) 1147–1156.
- [37] J.F. Kolb, A.A.H. Mohamed, R.O. Price, R.J. Swanson, A. Bowman, R.L. Chiavarini, M. Stacey, K.H. Schoenbach, Cold

- atmospheric pressure air plasma jet for medical applications, *Appl. Phys. Lett.* 92 (24) (2008) 241501.
- [38] T. Shimizu, B. Steffes, R. Pompl, F. Jamitzky, W. Bunk, K. Ramrath, M. Georgi, W. Stolz, H.-U. Schmidt, T. Urayama, S. Fujii, G.E. Morfill, Characterization of microwave plasma torch for decontamination, *Plasma Processes Polym.* 5 (6) (2008) 577–582.
- [39] S. Rupf, A. Lehmann, M. Hannig, B. Schafer, A. Schubert, U. Feldmann, A. Schindler, Killing of adherent oral microbes by a non-thermal atmospheric plasma jet, *J. Med. Microbiol.* 59 (Pt 2) (2010) 206–212.
- [40] M. Kuchenbecker, N. Bibinov, A. Kaemling, D. Wandke, P. Awakowicz, W. Viöl, Characterization of DBD plasma source for biomedical applications, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42 (2009) 045212.
- [41] E. Robert, E. Barbosa, S. Dozias, M. Vandamme, C. Cachoncinlle, R. Viladrosa, J. Pouvesle, Experimental study of a compact nanosecond plasma gun, *Plasma Process. Polym.* 6 (2009) 795–802.
- [42] M. Kaiser, R. Emmerich, H. Urban, M. Joos, P. Elsner, Bifocal plasma source for treatment of gaseous pollutants, *Surface and Coatings Technology*, Volumes 174–175, September–October 2003, Pages 498-502,
- [43] U. Roland, F. Holzer, F.-D. Kopinke, Improved oxidation of air pollutants in a non-thermal plasma, *Catalysis Today*, Volume 73, Issues 3–4, 15 April 2002, Pages 315-323
- [44] Alice M. Harling, David J. Glover, J. Christopher Whitehead, Kui Zhang, The role of ozone in the plasma-catalytic destruction

- of environmental pollutants, *Applied Catalysis B: Environmental*, Volume 90, Issues 1–2, 25 July 2009, Pages 157-161
- [45] Narengerile, T. Watanabe, Acetone decomposition by water plasmas at atmospheric pressure, *Chemical Engineering Science*, Volume 69, Issue 1, 13 February 2012, Pages 296-303
- [46] Hiroshi Nishioka, Hironori Saito, Takayuki Watanabe, Decomposition mechanism of organic compounds by DC water plasmas at atmospheric pressure, *Thin Solid Films*, Volume 518, Issue 3, 1 December 2009, Pages 924-928
- [47] Narengerile, Min-Hao Yuan, Takayuki Watanabe, Decomposition mechanism of phenol in water plasmas by DC discharge at atmospheric pressure, *Chemical Engineering Journal*, Volume 168, Issue 3, 15 April 2011, Pages 985-993
- [48] M. Magureanu, D. Piroi, N.B. Mandache, V. David, A. Medvedovici, C. Bradu, V.I. Parvulescu, Degradation of antibiotics in water by non-thermal plasma treatment, *Water Research*, Volume 45, Issue 11, May 2011, Pages 3407-3416
- [49] Monica Magureanu, Daniela Piroi, Nicolae Bogdan Mandache, Victor David, Andrei Medvedovici, Vasile I. Parvulescu, Degradation of pharmaceutical compound pentoxifylline in water by non-thermal plasma treatment, *Water Research*, Volume 44, Issue 11, June 2010, Pages 3445-3453
- [50] C. Gurol, F.Y. Ekinci, N. Aslan, M. Korachi, Low Temperature Plasma for decontamination of *E. coli* in milk, *International Journal of Food Microbiology*, Volume 157, Issue 1, 15 June 2012, Pages 1-5
- [51] A. Fröhling, J. Durek, U. Schnabel, J. Ehlbeck, J. Bolling, O. Schlüter, Indirect plasma treatment of fresh pork: Decontamination efficiency and effects on quality attributes,

Innovative Food Science & Emerging Technologies, Volume 16,
October 2012, Pages 381-390

- [52] ŠRAM, Vlastimil. FUNKČNÍ TENKÉ VRSTVY PRO APLIKACE VYUŽÍVAJÍCÍ POKROČILÉ OXIDAČNÍ PROCESY. České Budějovice, 2013. Diplomová práce. Jihočeská universita v Českých Budějovicích.
- [53] Bartoš, P., Blažek, J.: Hybrid computer simulation scheme for computational study of low temperature plasma containing micron-sized dust particles, IEEE Transactions on Plasma Science, Vol. 38, Issue 9, 2010, pp. 2407-2411.
- [54] Information about LCD and Plasma TV Technology. Bambooav [online]. 2011 [cit. 2013-08-09]. Dostupné z: <http://www.bambooav.com/information-about-lcd-and-plasma-tv-technology.html>
- [55] Martin, M. Peter: Handbook on Deposition Technologies for Films and Coatings, third edition, Elsevier, United States, 2010.
- [56] FOTOKATALYTICKÉ APLIKACE. Advancedmaterials1 [online]. 2013 [cit. 2013-08-09]. Dostupné z: http://www.advancedmaterials1.com/index_soubory/Page351.htm