

Dva roky excelentného výskumu

01.03.2022

Sú to už plné dva roky, čo Slovenská technická univerzita v Bratislave – Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave začala riešiť významný projekt **Vedeckovýskumné centrum excelentnosti SlovakION pre materiálový a interdisciplinárny výskum** (<https://teaming.mtf.stuba.sk/>), kód projektu ITMS 2014+: 313011W085, ktorý je podporený v rámci operačného programu Integrovaná infraštruktúra 2014-2020 spolufinancovaného zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja **vo výške takmer 10 miliónov eur**. Hlavné aktivity projektu pre rok 2021 boli smerované na **rozvoj excelentného pracoviska a posilnenie vedeckého inštitútu SlovakION pre etablovanie sa v ERA v transdisciplinárnych VaV oblastiach RIS3**.

Riešitelia projektu sa venovali analytickému výskumu, realizácii mnohých výpočtov a meraní a tiež experimentálnej činnosti, z čoho pramení publikačná aktivita, kde vznikli významné vedecké príspevky v bonitných, najmä zahraničných vedeckých časopisoch. Realizovali sa benchmark výpočty NMR tieniaia iónov alkalických kovov v iónových kvapalinách v kooperácii s CERN-ISOLDE (Švajčiarsko), výpočty povrchových a interface energií pre Ag/AlN Cu/AlN, upscaling pomocou klasických comb3 potenciálov v spolupráci s EMPA, Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, ale i ladenie prostredia ASE na výpočty energií pre Monte Carlo simulácie vysoko-entropických zliatin. Výpočtovo sa hľadali najstabilnejšej štruktúry pomocou evolučných algoritmov (EA) kryštálových štruktúr Ni₂O₃ (odladovanie technických parametrov a priebežný monitoring). Chemická syntéza Ni₂O₃ pre plánovanú publikáciu s pracovným názvom Explaining the existence of crystalline Ni₂O₃. Modelovania kryštálových štruktúr PdO₂ pomocou evolučných algoritmov.

Významnými aktivitami boli: výber materiálových kompozícií pre plazmové nanášanie povlakov s využitím nového pulzného generátora vysokointenzívnej plazmy, vyhodnocovanie experimentálnych dát pomocou analytických SW modulov, modifikovanie materiálových vlastností v modeloch zaoberajúcimi sa mechanicko-tepelnými napätiami v systéme supravodivá páska modifikovaná kompozitom s vysokou tepelnou vodivosťou a vyhodnocovanie dát z vypočítaných modelov. Pokračovalo sa v analýze zliatin AlCoCuxFeNi (x= 0.6, 0.8, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0) po odliatí. Analyzovali sa výsledky röntgenovej difrakcie tak na práškových, ako aj na objemových vzorkách. Realizácia experimentov implantácie PdOx, analýza vzoriek, potvrdenie úspešnosti experimentu, optimalizácia procesných parametrov. Vyhodnotenie dát z XRD a RBS. Meranie a vyhodnocovanie PdOx naprášených povlakov pomocou metódy RBS a PIXE. Jednalo sa najmä kontrolu a korekciu parametrov technológie naprašovania.

Pokračovalo sa v meraniach RBS/kanálovania na experimentálnych Si vzorkách, ktoré spočívalo v spolupráci s automatizérmí na príprave špeciálneho programu, ktorý automaticky generuje a spracúva dávku súborov, ktoré sa vkladajú do meracieho systému 6 MV Tandetronu. Ďalšími aktivitami boli koordinácia aktivít na 6 MV tandetrone a 500 kV iónovom implantátore, vyhodnocovanie dát z experimentov implantácie PdOx, vyhodnotenie snímok transmisnej elektrónovej mikroskopie a záznamov elektrónovej difrakcie, realizácia experimentu testovania radiačnej odolnosti GaAs polovodičových substrátov za účelom vyhodnotenia vplyvu intenzity toku iónov na radiačné poškodenie.

Realizovala sa inštalácia iónového zdroja TORVIS s príslušenstvom, oživovanie a preverovanie správnej funkčnosti jednotlivých súčastí iónového zdroja na plyny (H, He) (aj s elektro-magnetickým analyzátorom a injektorom s monitorovacím systémom zväzku) TORVIS ako ďalšieho injektora do 6 MV tandemového urýchľovača iónov Tandetron, HVE. Iónový zdroj TORVIS bude slúžiť ako vysokoprúdový zdroj H a He záporných iónov pre 6 MV Tandetron, tandemovo urýchľovač iónov. Ďalšími aktivitami boli riešenie komunikácie medzi riadiacim počítačom a jednotlivými meracími a riadiacimi blokmi zabezpečujúcimi diaľkové riadenie TORVIS systému, tiež upgradovanie ďalšieho iónového zdroja – Duoplasmatron, testovanie a hľadanie vhodného zostavenia.

Testovacie FullCI a CASSCF výpočty v rôznych programových balíkoch (GAMESS-US, MOLCAS) sa realizovali pre návrh metodológie separácie statickej a dynamickej korelácie. V prvotnej fáze reprodukuje výsledky pre molekulu CO v rovnovážnej a natiahnutej geometrii, prípadne lineárnu retiazku vodíkov. Simulácie 1D-molekulárneho nanovlákná fluoridu striebra odvodeného z vysokotlakej fázy, štúdium podmienok dynamickej stability pri nadkritickom režime uniaxiálneho namáhania štruktúry prvoprincípovými metódami, elektrónová štruktúra vysokotlakej kryštalickej fázy AgF₂ s nanorúrkovými štruktúrnymi jednotkami v GGA-DFT a hybridnom výmenno-korelačnom funkcionáli, výpočty hustoty elektronických stavov a pásmová štruktúra, predstavovali aktivity v roku 2021.

Najvýznamnejšími úspechmi v druhom roku riešenia projektu bolo najmä publikovanie dvoch článkov:

1) v časopise Nanoscale Advances: **„A new approach to near-surface positron annihilation analysis of ion irradiated ferritic alloys.“** Táto práca poskytuje inovatívny prístup k štúdiu materiálových štruktúr vystavených ožiareniu iónovým zväzkom s pomalým pozitronovým lúčom (SPB) blízko povrchu. Tento prístup umožňuje použitie spektroskopie doby života pozitronovej anihilácie s premenlivou energiou (PALS) na charakterizáciu širokého rozsahu mikroštruktúrného poškodenia pozdĺž profilu implantácie iónov. V typickej aplikácii techniky SPB PALS sa životnosť pozitronov používa na

poskytovanie kvalitatívnych informácií o veľkosti zhlukov voľných miest ako funkcie energie pozitronov, t.j. hĺbky sondovania spektrometra. Tento prístup je obmedzený na určitú koncentráciu defektu, nad ktorou je životnosť pozitronu nasýtená. Autori v experimentoch skúmali spätnú difúziu pozitronov a ich anihiláciu na povrchu. Pravdepodobnosť takejto udalosti je charakterizovaná dĺžkou difúzie pozitronov a závisí od hustoty defektov mriežky, dokonca aj v rozsahu saturácie životnosti pozitronov. Doteraz boli experimenty so spätnou difúziou uvádzané iba v súvislosti s Dopplerovou rozširujúcou spektroskopiou (DBS) pozitronového anihilačného žiarenia. Aby sa overila správnosť použitého prístupu, porovnávali sa získané výsledky na zliatine Fe9Cr implantovanej héliom a jej variantu spevneného oxidovou disperziou s transmisnou elektrónovou mikroskopiou a „konvenčnou“ analýzou pomalých pozitronov DBS.

2) v časopise Journal of Materials Science & Technology: **On the helium bubble swelling in nano-oxide dispersion-strengthened steels.** Autori v práci skúmajú vplyv transmutačného hélia, ktoré má výrazný vplyv na radiačnú odolnosť v porovnaní s poškodením bez akumulácie hélia. Transmutačné hélium vzniká predovšetkým v radiačných prostrediach tzv. rýchlych štípných jadrových reaktorov, jadrovej fúzie ako aj spalačných systémoch. V tejto štúdií sa prvýkrát konfrontovali dáta získané z pozitronovej anihilačnej spektroskopie a transmisnej elektrónovej mikroskopie, pomocou ktorých autori zostavili model predpovede a dynamiky radiačného poškodenia. Výsledky poukazujú aj na to, že materiály, ktoré v klasických radiačných podmienkach vyhovujú, môžu v podmienkach tvorby transmutačného hélia zlyhať. Konkrétne porovnanie jadrových ocelí Eurofer97 a jej ODS (oxide dispersion strenghtened) verzii (nanopráškom oxidov zosilnená oceľ obsahuje množstvo rozhraní, ktoré dokážu radiáciou vzniknuté defekty pohltiť a tým sa materiál stáva výrazne odolnejším voči zmene vlastností, predovšetkým problematickému krehnutiu) ukázalo, že vylepšená ODS-Eurofer sa v prípade radiačného poškodenia spojeného s tvorbou transmutačného hélia sa od klasickej Eurofer97 líši len v momente nástupe krehnutia, a od tohto momentu (meraného v množstve akumulovaného hélia) už degradujú prakticky rovnako.

Významná spolupráca pokračuje s CERN-ISOLDE a taktiež so Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, EMPA Dubendorf, Ruđer Bošković Institute v Zagrebe, ale i Fyzikálnym ústavom SAV Bratislava. **Výsledky projektu sa budú uplatňovať v priemyselnej praxi** poskytnutím riešení pre výskum v oblasti prípravy materiálov, ktoré nájdu uplatnenie v oblasti energetiky, automobilového priemyslu, optike, elektrotechnike, fotovoltaike, príp. špecifických technológiách displejov, výrobných technológiách, informačných a komunikačných technológiách, optike, sensorike. **Naplnenie generálneho cieľa projektu** vytvorí udržateľné excelentné výskumno-vývojové, inovačné a inštitucionálno-riadiace prostredia na realizáciu aktivít v oblasti materiálového výskumu pokračuje a výrazným spôsobom kreuje slovenskú vedu. Aktivity projektu majú ambície dosiahnuť **štatút medzinárodne vedecky konkurencie schopného centra najmä v oblasti materiálového výskumu** využívajúceho technológie iónových zväzkov a plazmy, ale aj v interdisciplinárnych oblastiach výskumno-vývojových aktivít.

Realizácia projektu: Slovenská technická univerzita v Bratislave – Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, **Kontakt:** doc. Ing. Róbert Riedlmajer, PhD. – zodpovedný riešiteľ projektu (robert.riedlmajer@stuba.sk)

Táto tlačová správa vznikla vďaka podpore v rámci operačného programu Výskum a inovácie pre projekt: Vedeckovýskumné centrum excelentnosti SlovakION pre materiálový a interdisciplinárny výskum, kód projektu v ITMS2014+ : 313011W085 spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja."