

Dva roky excelentného výskumu

Pridané 28. februára 2022 - Odporúčame



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, pričom vznikli významné vedecké príspevky v bonitných, najmä zahraničných vedeckých časopisoch. Realizovali sa benchmark výpočty NMR tienia 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 vysokoentropických zliatin. Výpočtovo sa hľadali najstabilnejšie štruktúry pomocou evolučných algoritmov (EA) kryštálových štruktúr Ni_2O_3 (odladovanie technických parametrov a priebežný monitoring). Chemická syntéza Ni_2O_3 pre plánovanú publikáciu s pracovným názvom *Explaining the existence of crystalline Ni_2O_3* . Modelovania kryštálových štruktúr PdO_2 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 $\text{AlCoCu}_x\text{FeNi}$ ($x = 0.6, 0.8, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0$) po odliatí. Analyzovali sa výsledky röntgenovej difrakcie tak na práškových, ako aj na objemových vzorkách. Realizácia experimentov implantácie PdO_x , 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. Išlo 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, tandemový 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 prvej 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 mikroštruktúrneho 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 variant 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 štiepných jadrových reaktorov, jadrovej fúzie, ako aj spalačných systémoch. V tejto štúdii 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 strengthened) 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 nástupu 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 Záhrebe, 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, prípadne špecifických technológiách displejov, výrobných technológiách, informačných a komunikačných technológiách, optike, senzorike. **Naplnenie generálneho cieľa projektu** vytvoriť udržateľné excelentné výskumno-vývojové, inovačné a inštitucionálno-riadiace prostredia na realizáciu aktivít v oblasti materiálového výskumu pokračuje a výrazným spôsobom kreuje slovenskú vedu. Aktivita 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.

Text a foto Slovenská technická univerzita v Bratislave
Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Tento článok vznikol 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.