

Tlačová správa projektu Vedeckovýskumné centrum excelentnosti SlovakION pre materiálový a interdisciplinárny výskum

Hlavná aktivita projektu: **Rozvoj excelentného pracoviska a posilnenie vedeckého inštitútu SlovakION pre etablovanie sa v ERA v transdisciplinárnych VaV oblastiach RIS3** - priebeh hlavnej aktivity projektu za monitorovacie obdobie od 1.1.2022 do 31.12.2022:

Riešitelia projektu sa venovali analytickému výskumu, vykonávali sa analýzy dát teploty topenia Morse nanovrstiev v závislosti od misfitu a d_0 parametra cross-interface Morse potenciálu, overovanie hypotéz o univerzalite nájdených závislostí, diskusie so spolupracujúcim teamom z EMPA o modeloch AlN Cu nanovrstiev, porovnávanie Tersoff-Morse-EAM modelu s ab initio dátami pre Cu/AlN rozhranie, prezentácia ab initio modelov beta-NMR jadier v iónových kvapalinách pre CERN a výpočty tranzitných bariér na Cu/AlN rozhraní metódou NEB.

Realizovali sa výskumné aktivity na 6 MV tandetrone a 500 kV iónovom implantátore. Pravidelná energetická kalibrácia 6MV Tandetronu využívajúca jadrovú reakciu $^{27}\text{Al}(p,\gamma)$. Testovanie optimálnych parametrov 358 upgradovaného iónového zdroja a testovanie zdroja TORVIS s ohľadom na dlhodobú stabilitu prevádzky. Optimalizácia prevádzkových parametrov iónového zdroja TORVIS pre prácu s vodíkovým - H₂ a dusíkovým N₂ zväzkom. Boli merané hmotnostné spektrá výstupu TORVISU (35 kV) a Tandetronu (2 MV) pomocou magnetu TORVISU ako aj analyzujúceho magnetu na vysokoenergetickej strane po urýchlení Tandetronom. Tiež bol optimalizovaný tlak stripera Tandetronu pre jednotlivé výstupné frakcie.

Merania obsahu bóru a hĺbkových profilov bóru v tenkých vrstvách BDD (bórom dopovaný diamant) narastených na Al₂O₃ podložkách technológiou MWCVD (microwave plasma chemical vapour deposition) v spolupráci s Fyzikálnym ústavom Českej akadémie vied. Obsah bóru bol od 1,3 po 0 at.%. Na analýzu boli použité viaceré energie urýchlených protónov a dve jadrové reakcie - NRA (analýza s využitím jadrových reakcií).

Uskutočnila sa profilová analýza vzoriek vyrobených z hliníkovej zliatiny (silumín) resp. nehrdzavejúcej ocele, do podvrchových vrstiev ktorých boli implantované vysokoenergetické ióny kremíka. V téme zameranej na charakterizáciu nanoštruktúrnych multivrstiev Al-Co-Cu, pripravených magnetronovým naprašovaním na kremíkovom substráte a následne miešaných pri rôznych teplotách pomocou iónového zväzku rôznej fluencie.

Vykonané výskumné činnosti mali analyticko-interpretáčny charakter a týkali sa aj súvisu medzi prvkovým zložením, pH elektrolytu a elektrochemickými vlastnosťami dvoch zliatin spadajúcich do skupiny Zn-Mg-Y. Mikroštruktúra a prvkové rozloženie zliatin boli zdokumentované pomocou rastrovacej elektrónovej mikroskopie resp. energiovo disperznej analýzy röntgenového žiarenia (EDX). Elektrochemické vlastnosti boli merané na potenciostate pomocou elektródovej polarizačnej metódy v troch rôznych elektrolytoch s rozdielnym pH (kyslom, neutrálnom a zásaditom) a prezentované vo forme potenciodynamických polarizačných kriviek. Ako pomocné kritérium bol hodnotený potenciál otvorenej slučky (OCP). Bolo zistené, že korózna odolnosť zliatin rastie so stúpajúcim pH elektrolytu a korózný potenciál spravidla rastie so stúpajúcim objemovým obsahom Zn v zliatine.

Výpočet NMR tienenia na úrovni MP2, CCSD, CCSD(T), DHF, DKS. Z predbežných výsledkov NMR tienenia boli odvodené magnetické momenty a analyzovali sa voči existujúcim tabuľkovým hodnotám. So spolupracujúcim pracoviskom UMK Toruň bol diskutovaný vplyv rozhrania na stabilizáciu exotických fáz oxidov, a naplánovaný workflow pre počítanie vlastností molekulových kryštálov.

FNDMC výpočty systémov HF a CO za účelom porovnania závislosti FNDMC chyby na miere statickej korelácie so systémom H₂-H₂. Vývoj korelačnej energie pozdĺž PES pre molekulu BeO s použitím ECP báz. Porovnanie so systémom CO, vplyv dvojitej (trojitej) väzby na vývoj korelácie v disociácií. CCSD(T) a CR-CCSD(T) výpočty pre multireferenčné systémy so slabou/silnou koreláciou. QMC výpočty pre systémy HF a BeO.

Výskum nových fáz oxidov niklu Ni₂O₅ pomocou evolučných algoritmov EA/DFT na lokálnom výpočtovom klastri. Odlaďovanie DFT optimalizačných krokov pre vygenerované kryštálové štruktúry Z=2-4 so zvýšenou výpočtovou náročnosťou a vyhodnocujúce testovacie reštarty. Výskum kryštalických materiálov na báze fluoridov a chloridov striebra.

Najvýznamnejšími úspechmi v treťom roku riešenia projektu TEAMING bolo najmä publikovanie článkov v časopisoch, ktoré majú vysokú bonitu v svetovom rankingu vedeckých časopisov podľa JCR v kvartiloch Q1-Q2, z ktorých vyberáme tri:

- 1) v časopise Physical Review B: „**Charge ordering mechanism in silver difluoride.**“ (Mechanizmus nábojového usporiadania v binárnom fluoride striebra)
<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.105.L081113>
- 2) v časopise Optical Materials: **Low optical losses in plasmonic TiN thin films implanted with silver and gold** (Nízke optické straty v plazmonických tenkých vrstvách TiN implantovaných striebrom a zlatom).
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925346721011368>
- 3) v časopise Astrophysical Journal: **NICER monitoring of Supersoft X-Ray Sources. (NICER monitoring mäkkých zdrojov röntgenového žiarenia)**
<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2022ApJ...932...450/abstract>

Významná spolupráca pokračuje s CERN-ISOLDE a taktiež so Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, ESA www.esa.int, HZDR, HZDR I, EMPA Dubendorf, UMK Toruń www.umk.pl, Ruđer Bošković Institute v Zagrebe, European Commission, Joint Research Centre, Petten, Holandsko, Katedra fyziky materiálov Matematicko-fyzikálnej fakulty Univerzity Karlovy Praha, ale i Fyzikálnym ústavom SAV Bratislava a Ústavom materiálového výskumu SAV Košice.

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, senzorike.

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)



MINISTERSTVO ŠKOLSTVA,
VEDY, VÝSKUMU A ŠPORTU
SLOVENSKEJ REPUBLIKY



OPERAČNÝ PROGRAM
VÝSKUM A INOVÁCIE

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.“