



Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0492-11**
Nanokryštalické a kvázikryštalické kovové systémy s cielene modifikovanou štruktúrou a morfológiou

Zodpovedný riešiteľ **Ing. Peter Švec, DrSc.**

Príjemca **Fyzikálny ústav SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Fyzikálny ústav SAV
2. Ústav experimentálnej fyziky SAV
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Fakultät für Physik and Center for Computational Materials Science, Universität Wien, Wien, Austria
2. Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai, Japan
3. Departamento de Física de la Materia Condensada, ICM-SE CSIC, Universidad de Sevilla, Sevilla, Spain
4. SIMaP : Sciences de l'Ingénierie des Matériaux et Procédés, Grenoble-INP, UJF, CNRS, Grenoble, France
5. IUTA and Departamento de Física, Universidad de Oviedo, Gijon, Spain

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

1. Prihláška patentu č. PP50045-2014 s názvom Viacvrstvové pásy na báze zliatin kovov a spôsob ich výroby, podaná 2. 7. 2014. Pôvodcovia: P. Švec (st.), D. Janičkovič, M. Halasz, P. Švec, J. Hoško
2. PP 44-2013 s názvom: Konštrukčný prvok na báze jedno a viacvrstvého kovového skla a spôsob jeho výroby, podaná 10. 5. 2013. Povodcovia: P. Svec, P. Svec ml., D. Janickovic, M. Halasz, J. Hosko.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. M. Krajci, A.-P. Tsai, J. Hafner,
Understanding the selectivity of methanol steam reforming on the (111) surfaces of NiZn, PdZn and PtZn: Insights from DFT
Journal of Catalysis 330 (2015) 6–18
2. M. Krajci, J. Hafner,
Intermetallic Compounds as Selective Heterogeneous Catalysts : Insights from DFT
ChemCatChem 8 (2016) 34–48.
3. M. Rivas, J. C. Martiinez-Garcia, I. Skorvanek, J. Marcin, P. Svec, P. Gorria,
Magnetostatic interaction in soft magnetic bilayer ribbons unambiguously identified by first-order reversal curve analysis. Applied Physics Letters 107 (2015) 132403.
4. P. Svec, P. Svec Sr., J. Hosko, D. Janickovic, Formation of monophasic Fe₂₃B₆-type alloy via crystallization of amorphous Fe-Ni-Nb-B system
Journal of Alloys and Compounds 590 (2014) 87–91
5. J. S. Blazquez, J. Marcin, M. Varga, V. Franco, A. Conde, I. Škorvánek, Influence of microstructure on the enhancement of soft magnetic character and the induced anisotropy of field annealed HITPERM - type alloys
Journal of Applied Physics, Volume 117, Issue 17, (2015) Art. Number 17A301

Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt mal charakter základného výskumu, kde sa kombináciou prvoprincípových výpočtov, technológií a experimentov navrhli a pripravili početné systémy kovových zliatin a komplexných kovových materiálov a kompozitov v tvare objemových materiálov ale najmä pások pozostávajúcich z dvoch alebo troch vrstiev a výraznou pridanou hodnotou vo vlastnostiach daných kombináciou zložení alebo zvýšením hrúbky. Preskúmali sa ich štruktúrne, fyzikálne a niektoré technické vlastnosti priamo naznačujúce ich využitie. Vznikli o.i. tri systémy magneticky mäkkých nanokryštalických materiálov pre použitie v magnetických obvodoch, senzoričke a tienení. Preskúmali sa objemy a povrchy vybraných komplexných kovových systémov s ohľadom na ich katalytické vlastnosti a s perspektívou použitia pre selektívnu hydrogenáciu napr. acetylénu a v procese reformingu metanolu. Významnou technológiou pre technické uplatnenie je vývoj zariadení na tepelné spracovanie v silných magnetických poliach na cieľené dosiahnutie napr. vynikajúcich vlastností magneticky mäkkých materiálov.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Spoločným úsilím celého riešiteľského kolektívu s využitím komplementarity v expertíze a vybavení a kombináciou teoretických prístupov a prvoprincípového modelovania s technologickou prípravou vzoriek, širokou škálou experimentov a novovyvinutých fyzikálne zvolených metód spracovania bolo možné dosiahnuť cenné korelácie medzi výsledkami získanými na viacerých rozdielnych komplexných kovových systémoch a ich zobecnenie. Toto umožnilo ďalší pokrok v návrhu skúmaných materiálov a technikách ich spracovania počas samotnej prípravy (zvyčajne v roztavenom stave) a po príprave (pri fyzikálnom spracovaní a cieľenej optimalizácii). Dosiahnuté výsledky stimulovali rozvoj ďalších modelovacích a experimentálnych prístupov vedúcich k skúmaniu a pochopeniu komplexných kovových štruktúr a procesov na atomárnej úrovni. Novozískané nástroje a nadobudnuté skúsenosti viedli aj k návrhu nových tried nanokryštalických magnetických materiálov nad rámec cieľov projektu. Výrazný pokrok sa dosiahol aj v pochopení a vysvetlení vybraných procesov katalýzy vo vzťahu k atomárnej štruktúre povrchov komplexných intermetalík a v interpretácii atomárnych usporiadaní v týchto systémoch.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku
(max. 20 riadkov)

Joint effort of the entire project team using complementarity in expertise, equipment and combinations of theoretical approaches and ab-initio modeling with sample preparation technologies, broad range of experiments and newly developed physical processing methods has led to progress in correlating the results obtained on different complex metallic systems and to their generalization. This has enabled further progress in design of new materials and processing techniques during material preparation (frequently in the melt) and in post-preparation stages (during physical processing and targeted optimization in solid state). The obtained results have stimulated further development of modeling and experimental approaches leading to investigation and enhancement in understanding of complex metallic structures and processes on atomic level. Newly acquired expertise and developed research approaches lead also to design of new classes of nanocrystalline magnetic materials beyond the planned scope of the project. Significant progress has been obtained in understanding and elucidation of selected catalytic processes related to the atomic structure of surfaces of complex intermetallics and in the interpretation of specific atomic ordering in these systems.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Ing. Peter Švec, DrSc.

V Bratislave 28.1.2015

Štatutárny zástupca príjemcu

RNDr. Stanislav Hlaváč, CSc

V Bratislave 28.1.2015

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu