

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0076-11**

Štúdium kryštálovej štruktúry a termodynamických vlastností komplexných kovových zliatin na báze hliníka respektíve zinku

Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Jozef Janovec, DrSc.**

Príjemca **Slovenská technická univerzita v Bratislave**
Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave
2. Slovenská akadémia vied, Fyzikálny ústav v Bratislave
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Universität Wien, Fakultät für Physik and Center for Computational Materials Science
2. Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Hamburg
3. Akademie věd České republiky, Ústav fyziky materiálov v Brně

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

- 1.
- 2.
- 3.

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

1. Krajčí, M. – Hafner, J.: Surfaces of intermetallic compounds: An ab initio DFT study for B20-type AlPd, Physical Review B, 87, 2013, 035436
2. Mihalkovič, M. – Henley, C.L., Caged clusters in Al₁₁Ir₄: Structural transition and insulating phase, Physical Review B, 88, 2013, 064201
3. Černičková, I. – Švec, P. – Watanabe, S. – Čaplovič, L. – Mihalkovič, M. – Kolesár, V. – Priputen, P. – Bednarčík, J. – Janičkovič, D. – Janovec, J.: Fine structure of phases of ε-family in Al_{73.8}Pd_{11.9}Co_{14.3} alloy, Journal of Alloys and Compounds, 609, 2014, 73-79

4. Kolesár, V. – Priputen, P. – Bednarčík, J. – Černičková, I. – Svoboda, M. – Drienovský, M. – Janovec, J.: Evolution of phases in Al₅₅Ni₃₀Pd₁₅ alloy at temperatures up to 600 °C, *Intermetallics*, 46, 2014, 141-146

5. Priputen, P. – Kusý, M. – Drienovský, M. – Janičkovič, D. – Čička, R. – Černičková, I. – Janovec, J.: Experimental reinvestigation of Al-Co phase diagram in vicinity of Al₁₃Co₄ family of phases, *Journal of Alloys and Compounds*, 647, 2015, 486-497

Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt mal charakter základného výskumu s využitím teoretických aj experimentálnych prístupov a exaktných, prevažne fyzikálnych, nástrojov poznávania. Predmetom výskumu boli hlavne štruktúrne komplexné zliatinové systémy na báze hliníka, zinku a výnimočne aj iných prvkov. Vedecké výsledky projektu spadajú do oblasti materiálových vied a môžu slúžiť ako poznatková báza pre nadväzný základný aj aplikovaný výskum. V dlhodobom horizonte možno očakávať, že časť z nich sa stane odrazovým mostíkom pre inovácie v chemickom (napr. proces reformingu metanolu), petrochemickom (napr. selektívna hydrogenácia acetylénu), strojárskom (napr. vodíkové spaľovacie motory, povrchová ochrana extrémne namáhaných súčiastok v plynových turbínach) priemysle, ale aj elektronike, kde sa hľadajú aplikácie pre štruktúrne komplexné fázy s výnimočnými elektrickými, magnetickými alebo optickými vlastnosťami.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

Pomocou ab-initio výpočtov boli predikované štruktúrne detaily a povrchové energie dvojnásobných, trojnásobných a pseudopäťnásobných nízkoindexových povrchov v zlúčenine B₂₀-AlPd. Atómová štruktúra skúmaných povrchov bola súčasne optimalizovaná pomocou relaxácie medziatómových síl. || Bolo ukázané, že kvázikryštalický aproximant Al₁₁Ir₄ sa skladá z neštandardnej verzie pseudo-Mackayovho ikosaedrálného klastra s vnútorným klastrom typu Al₁₀Ir a/alebo Al₉Ir. || V nerovnovážnej štruktúre zliatiny Al_{73.8}Pd_{11.9}Co_{14.3} bola nájdená korelácia medzi lokálnymi zmenami chemického zloženia v rámci oblastí zodpovedajúcich rodine epsilon a typom fazónového dlaždicovania. V podmienkach kontinuálneho ohrevu boli zaznamenané zmeny v podiele fáz ϵ_{16} a ϵ_{28} , čo potvrdilo ich vysokú senzitivitu na vonkajšie podnety. || Počas dlhodobého žihania zliatiny Al₅₅Ni₃₀Pd₁₅ pri 600°C bola identifikovaná hexagonálna fáza a dve izoštruktúrne kubické fázy. Bolo preukázané, že výskyt týchto ultradisperzných fáz, ich chemické zloženie aj dĺžka mriežkových parametrov sa menia s dobou žihania. || Experimentálne bolo ukázané, že tzv. „oblasti vnútorne dvojčatenej fázy Y-Al₁₃Co₄“, spomínané v odbornej literatúre, sa v skutočnosti skladajú z dvoch fáz, monoklinickej Y₁-Al₁₃Co₄ a ortorombickej Y₂-Al₁₃Co₄, z ktorých len prvá je termodynamicky stabilná. Metastabilná fáza Y₂-Al₁₃Co₄ vzniká z fázy Y₁-Al₁₃Co₄ v dôsledku vnútorných napätí, ktoré spravidla sprevádzajú fázové premeny v pevnom stave. Bol navrhnutý modifikovaný fázový diagram Al-Co. || Všetky hlavné vedecké ciele špecifikované v návrhu projektu boli splnené, pričom riešitelia projektu dosiahli viacero vedecky hodnotných, originálnych výsledkov.

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

Structure details and surface energies of two-, three-, and quasifive-fold low-index surfaces were predicted by means of ab-initio calculations for the B₂₀-AlPd compound. The atomic structures of investigated surfaces were also optimized by the relaxation of interatomic forces. || There was shown that the quasicrystalline approximant Al₁₁Ir₄ contains a nonstandard version of the “pseudo-Mackay” icosahedral cluster, with inner Al₁₀Ir and/or Al₉Ir clusters. || In the non-equilibrium Al_{73.8}Pd_{11.9}Co_{14.3} alloy, the correlation was found between local changes in metal composition of areas corresponding to the epsilon family and types of

phason tiling. Under continuous heating, changes in portions of phases ϵ_{16} a ϵ_{28} were observed, confirming a high sensitivity of these phases to external factors. || The hexagonal and two cubic ultradispersive phases were identified in the Al₅₅Ni₃₀Pd₁₅ alloy on long-term annealing at 600°C. The occurrence, the metal composition, and the length of lattice parameters of these phases were found to be dependent on the annealing time. || There was shown by experiment that so-called “internally twined areas of the Y-Al₁₃Co₄ phase”, reported in the literature, consists of two phases in fact, the monoclinic Y₁-Al₁₃Co₄ and the orthorhombic Y₂-Al₁₃Co₄. The former phase was considered as thermodynamically stable, the latter phase as metastable, forming from the former one due to internal stresses accompanying phase transformations in solid state as a rule. It was proposed a modified version of the Al-Co phase diagram. || All the main scientific goals specified in the project proposal were fulfilled; the researchers involved accomplished several scientifically valuable original results.

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

Zodpovedný riešiteľ

prof. Ing. Jozef Janovec, DrSc.

V Trnave 20. 01. 2016

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. Dr. Ing. Jozef Peterka

V Trnave 22. 01. 2016

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu