

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0049****Rozvoj poznatkovej bázy v oblasti pokročilých kovových materiálov s využitím moderných teoretických, experimentálnych a technologických postupov**Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Jozef Janovec, DrSc.**Príjemca **Slovenská technická univerzita v Bratislave**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Žiadateľská organizácia: Slovenská technická univerzita v Bratislave

Spolupracujúce organizácie: Fyzikálny ústav SAV, Ústav materiálového výskumu SAV

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Vo vecnom zámere projektu nebolo uvedené žiadne spolupracujúce zahraničné pracovisko. Na karentovaných publikáciách, ktoré sú uvedené medzi výstupmi projektu, sa však ako autori podieľali pracovníci týchto zahraničných pracovísk:

Graz University of Technology (Rakúsko), IMDEA Nanoscience, Madrid (Španielsko), Institute of Metallurgy, Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg (Rusko), Institute of Physics of Materials, AS CR, Brno (ČR), Iran University of Science and Technology, Teheran (Irán), Ivan Franko National University of Lviv (Ukrajina), Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research, Jakkur (India), Masaryk University, Brno (ČR), Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Düsseldorf (Nemecko), Montanuniversität Leoben (Rakúsko), National Institute for Materials Science, Tsukuba (Japonsko), National Taipei University of Technology (Taiwan), National Taras Shevchenko University of Kyiv (Ukrajina), Technische Universität Bergakademie, Freiberg (Nemecko), Technische Universität Wien (Rakúsko), Tohoku University, Sendai (Japonsko), Université Catholique de Louvain (Belgicko), University of Belgrade (Srbsko), University of Novi Sad (Srbsko), University of Tehran (Irán), Ural Federal University, Yekaterinburg (Rusko), Ural State Pedagogical University, Yekaterinburg (Rusko), Vilnius University (Litva), VSB-Technical University of Ostrava (ČR)

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

Názov patentu: Spôsob tvarovania konštrukčného prvku

Autori patentu: P. Svec (Jr.), P. Svec (Sr.), D. Janickovic, J. Hosko, M. Halasz

Prihlasovateľ: Fyzikálny ústav SAV

Číslo dokumentu: 288586

Patent udelený: 06/2018

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

Černíčková, I. – Ďuriška, L. – Drienovský, M. – Janičkovič, D. – Janovec, J.: Phase transitions in selected Al-Pd-Co alloys on continuous cooling, *Kovové Materiály – Metallic Materials*, 55, 2017, 403-411.

Zigo, J. – Roik, O. – Švec, P. – Mihalkovič, M. – Švec, P. Jr. – Maťko, I.: Study of the Al-T-Si (T = Fe, Co, Ni) alloys in the solid, liquid and as-quenched states, *Materials Characterization*, DOI: 10.1016/j.matchar.2017.11.044.

Antušek, A. – Blaško, M. – Urban, M. – Noga, P. – Kisić, D. – Nenadović, M. – Lončarević, D. – Rakočević, Z.: Density functional theory modeling of C–Au chemical bond formation in gold implanted polyethylene, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19, 2017, 28897.

Noga, P. – Dobrovodský, J. – Vaňa, D. – Beňo, M. – Závacká, A. – Muška, M. – Halgaš, R. – Minárik, S. – Riedlmajer, R.: A new ion-beam laboratory for materials research at the Slovak University of Technology, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 409, 2017, 264–267.

Priputen, P. – Palcut, M. – Babinec, M. – Mišík, J. – Černičková, I. – Janovec, J.: Correlation between microstructure and corrosion behavior of near-equilibrium Al-Co alloys in various environments, *Journal of Materials Engineering and Performance*, 26, 2017, 3970–3976.

Khodabakhshi, F. – Gerlich, A. P. – Švec, P.: Fabrication of a high strength ultra-fine grained Al-Mg-SiC nanocomposite by multi-step friction-stir processing, *Materials Science and Engineering A*, 698, 2017, 313-325.

Krajčí, M. – Kameoka, S. – Tsai A. P.: Understanding the catalytic activity of nanoporous gold: Role of twinning in fcc lattice, *Journal of Chemical Physics*, 147, 2017, 044713.

L. Ďuriška – M. Palcut – M. Špoták – I. Černičková – J. Gondek – P. Priputen – R. Čička – D. Janičkovič – J. Janovec: Microstructure, phase occurrence, and corrosion behavior of as-solidified and as-annealed Al-Pd alloys, *Journal of Materials Engineering and Performance*, 27, 2018, 1601–1613.

A. Titov – Y. Jirásková – O. Životný – J. Buršík – D. Janičkovič: Microstructure and magnetism of Co₂FeAl Heusler alloy prepared by arc and induction melting compared with planar flow casting, *AIP Advances*, 8, 2018, 047206.

Y. Jirásková – N. Pizurová – A. Titov – D. Janičkovič – M. Friák: Phase separation in Fe-Ti-Al alloy - Structural, magnetic, and Mossbauer study, *Journal of Magnetism and Magnetic Properties*, 468, 2018, 91-99.

J. Rial – P. Švec – E. M. Palmero – J. Camarero – P. Švec, Sr. – A. Bollero: Severe tuning of permanent magnet properties in gas-atomized MnAl powder by controlled nanostructuring and phase transformation, *Acta Materialia*, 157, 2018, 42-52.

K. Nishimoto – M. Krajčí – T. Sakurai – H. Iwamoto – M. Onoda – C. Nishimura – J. T. Tsai – S. F. Wang – S. Kameoka – A. P. Tsai: Fast oxidation of porous Cu induced by nano-twinning, *Inorganic Chemistry*, 57, 2018, 2908-2916.

L. Ďuriška – I. Černičková – P. Priputen – J. Janovec: Partial experimental isothermal section of Al-Pd-Co phase diagram for Al-rich corner at 1020°C, *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 40, 2019, 45-52.

V. Homolová – L. Čiripová – J. Kepič: Isothermal section of the B-Cr-Fe system at 873 K, *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 40, 2019, 79-85.

Y. Plevachuk – O. Tkach – P. Švec, Sr. – P. Švec: Study of nonequilibrium solidification region in Sn_{96.5}Ag₃Cu_{0.5} alloys with carbon nanotube admixtures by electrical resistivity measurements, *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 40, 2019, 86-92.

M. Palcut – L. Ďuriška – I. Černičková – S. Brunovská – Ž. Gerhátová – M. Sahul – L. Čaplovič – J. Janovec: Relationship between phase occurrence, chemical composition, and corrosion behavior of as-solidified Al-Pd-Co alloys, *Materials*, 12, 2019, 1661.

P. Priputen – M. Drienovský – P. Noga – M. Kusý – I. Černičková – J. Janovec: Isothermal section of Ga-Co-Cu phase diagram at 830°C and its peculiarities, *Journal of Alloys and Compounds*, 785, 2019, 1173–1179.

O. Životný – J. Buršík – D. Janičkovič – A. Titov – Y. Jirásková: Low-temperature magnetic transitions in Fe₂MnSi Heusler alloys prepared in bulk and ribbon form, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 475, 2019, 5-9.

Y. Jirásková – J. Buršík – D. Janičkovič – O. Životný: Influence of preparation technology on microstructural and magnetic properties of Fe₂MnSi Heusler alloys, *Materials*, 12, 2019, 710. IF_2018: 2,972; 1xQ2. CC_7

S. Kameoka – M. Krajčí – A. P. Tsai: Highly selective semi-hydrogenation of acetylene over porous gold with twin boundary defects, *Applied Catalysis A, General*, 569, 2019, 101-109.

J. Dobrovodský – M. Beňo – D. Vaňa – P. Bezák – P. Noga: The first year operation experience with Ion Beam Analysis at the new STU Ion Beam Laboratory, *Nuclear*

- Instruments and Methods in Physics Research B, 450, 2019, 168-172.
- M. Popovič – M. Novakovič – P. Noga – D. Vaňa – Z. Rakočević: Synthesis of AuAg@Ag core/shell bimetallic nanoparticles in titanium nitride thin films by sequential ion implantation, Applied Surface Science, 481, 2019, 1418-1424.
- M. Friák – V. Buršíková – N. Pizurová – J. Pavlů – Y. Jirásková – V. Homola – I. Mihalíková – A. Slavík – D. Holec – M. Vsianska – N. Koutná – J. Fikar – D. Janičkovič – M. Šob – J. Neugebauer: Elasticity of phases in Fe-Al-Ti superalloys: Impact of atomic order and anti-phase boundaries, Crystals, 9, 2019, 6, 299.
- V. S. Marakatti – S. C. Sarma – S. Sarkar – M. Krajčí – E. M. Gaigneaux – S. C. Peter: Synthetically tuned Pd-based intermetallic compounds and their structural influence on the O₂ dissociation in benzylamine oxidation, ACS - Applied Materials and Interfaces, 11, 2019, 37602-37616.
- D. Kisič – M. Nenadovič – T. Barudžija – P. Noga – D. Vaňa – M. Muška – Z. Rakočević: Modification of polyethylene's surface properties by high fluence Fe implantation, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 462, 2020, 143-153.
- D. Kisič – M. Nenadovič – J. Potočník – M. Novakovič – P. Noga – D. Vaňa – A. Závacká – Z. Rakočević: Surface layer morphology of the high fluence Fe implanted polyethylene - Correlation with the magnetic and optical behavior, Vacuum, 171, 2020, 109016.
- K. Čajko – S. Lukič-Petrovič – N. Čelič – P. Noga – D. Vaňa: Influence of different metal concentrations on the morphology of Ag-As₂Ch₃ thin films analysed by Rutherford backscattering spectroscopy and energy dispersive spectroscopy, Applied Surface Science, 510, 2020, 145430.
- M. Novakovič – M. Popovič – P. Noga – D. Vaňa – Z. Rakočević: Formation of Au-Ag alloy nanoparticles in amorphous silicon using sequential ion implantation, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 441, 2020, 33-41.
- M. Popovič – M. Novakovič – P. Noga – D. Vaňa – Z. Rakočević: Formation of Au-Ag alloy nanoparticles in amorphous silicon using sequential ion implantation, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 475, 2020, 20-27.
- M. Khoshghadam-Pireyousefan – R. Rahmanifard – L. Orovčík – P. Švec – V. Klemm: Application of a novel method for fabrication of graphene reinforced aluminium matrix nonocomposites - Synthesis, microstructure, and mechanical properties, Materials Science and Engineering A, 772, 2020, 138820.
- B. A. Rusanov – V. E. Sidorov – P. Švec – P. Švec Sr. – D. Janičkovič – S. A. Petrova: Crystallization behavior and resistivity of Al-Ni-Co-Nd(Sm) amorphous alloys, Inorganic Materials, 56, 2020, 14-19.
- B. A. Rusanov – V. E. Sidorov – P. Švec Sr. – P. Švec – D. Janičkovič: Effects of rare-earth metals on the thermal stability and glass-forming ability of Al-Ni-Co-R amorphous alloys, Russian Journal of Inorganic Chemistry, 65, 2020, 663-667.
- M. Drienovský – M. Palcut – P. Priputen – E. Cuninková – O. Bošák – M. Kubliha – L. Rízeková Trnková: Properties of Sn-Ag-Cu solder joints prepared by induction heating, Advances in Materials Science and Engineering, 2020, 1724095.
- Y. Plevachuk – V. Sklyarchuk – G. Pottlacher – T. Leitner – P. Švec Sr. – P. Švec – L. Orovčík: The liquid AlCu₄TiMg alloy: thermophysical and thermodynamic properties, High Temperatures-High Pressures, 49, 2020, 61-73.
- P. Šulháněk – M. Drienovský – I. Černíčková – L. Ďuriška – R. Skaudžius – Ž. Gerhátová – M. Palcut: Oxidation of Al-Co alloys at high temperatures, Materials, 13, 2020, 3152.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výskum, realizovaný v rámci projektu, prispel hlavne k rozšíreniu stavu poznania vo vedeckej oblasti. Získané poznatky preto nemajú priamy dopad na výrobnú sféru. Prípadnú priemyselnú aplikáciu niektorých poznatkov možno očakávať až v dlhodobom časovom horizonte.

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

Teoretický výskum s využitím výpočtov z prvých princípov prispel k objasneniu výborných katalytických vlastností nanoporézneho zlata a medi, ako aj k posúdeniu katalytického účinku binárnych zlúčenín typu Pd-M (M = ďalší kovový prvok) pri oxidácii benzylamínu. Experimentálne štúdium podpovrchových štruktúr vytvorených pomocou iónovej implantácie

umožnilo rozšírenie poznatkov o tvorbe nanočastíc Au-Ag (rozmerov cca 10 nm) v tenkých vrstvách TiN, ako aj objasnenie mechanizmu tvorby klastrov bohatých na Ag v amorfných, komplexných, chalkogenidových vrstvách typu $\text{Ag}_x(\text{As}_4\text{S}_3\text{Se}_3)_{100-x}$ ($x \leq 5$ at.%). Experimentálne a termodynamické štúdium fázových rovnováh viedlo k rozšíreniu znalostí o fázovom diagrame Zn-Mg-Y, hlavne o izotermickom reze pri 400°C. Poznatky, získané počas riešenia projektu, umožnili navrhnuť aj izotermický rez fázového diagramu Al-Pd-Co pri teplote 1020°C a izotermický rez fázového diagramu Ga-Co-Cu pri teplote 830°C. Bol vytvorený symetrický, termodynamický model fázy AlX (X=Pd,Co). Experimentálne štúdium fázových transformácií napomohlo zdokumentovaniu fázových prechodov vo vybraných, pokročilých, hliníkových zliatinách typu Al-Co, Al-Pd, Al-Pd-Co, Al-Fe, Al-Mn, Al-Fe-Si, Al-Fe-Ti, Al-Fe-Mn, Al-Ni-Si, Al-Co-Si, Al-Mg-SiC a Co₂FeAl v podmienkach kontinuálneho ohrevu/ochladzovania resp. izotermického žihania pri rôznych teplotách. Experimentálne štúdium elektrochemickej korózie a vysokoteplotnej oxidácie prispelo k získaniu poznatkov o vzťahu medzi mikroštruktúrou a elektrochemickými vlastnosťami zliatin typu Al-Pd, Al-Co a Al-Pd-Co. Bolo ukázané, že fáza ϵ_n , prítomná v týchto zliatinách, sa počas potenciodynamickej polarizácie ochudobňuje o hliník (tzv. „de-alloying“). Na povrchu zliatin Al-Co sa počas oxidácie pri teplotách 500-900°C vytvorila vrstva Al₂O₃, ktorej kinetika rastu zodpovedala parabolickému zákonu. Príslušné konštanty rastu vykazovali teplotnú závislosť.

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

The theoretical research using first principle calculations contributed to both enlightenment of excellent catalytic properties of nano-porous gold and copper as well as consideration of the catalytic effect of binary Pd-M (M = another metallic element) alloys at benzylamine oxidation. The experimental studies of sub-surface structures fashioned by ion implantation enabled both extension of the knowledge about formation of Au-Ag nanoparticles (around 10 nm in length) in thin layers of TiN and elucidation of the formation mechanism of Ag-rich clusters in amorphous complex chalcogenide layers of $\text{Ag}_x(\text{As}_4\text{S}_3\text{Se}_3)_{100-x}$ ($x \leq 5$ at.%). The experimental and thermodynamic studies of phase equilibria led to the knowledge extension about the Zn-Mg-Y phase diagram, mainly its isothermal section at 400°C. The findings resulted from the project made possible to propose isothermal sections of phase diagrams both Al-Pd-Co at 1020°C and Ga-Co-Cu at 830°C. The symmetric thermodynamic model of the AlX phase (X=Pd,Co) was done. The experimental studies of phase transformations were helpful at mapping of phase transitions in advanced al-base alloys as Al-Co, Al-Pd, Al-Pd-Co, Al-Fe, Al-Mn, Al-Fe-Si, Al-Fe-Ti, Al-Fe-Mn, Al-Ni-Si, Al-Co-Si, Al-Mg-SiC, and Co₂FeAl, at either continuous heating/cooling or isothermal annealing at various temperatures. The experimental studies of electrochemical corrosion and high-temperature oxidation contributed to obtaining the knowledge about a microstructure dependence of electrochemical properties of alloys Al-Pd, Al-Co, and Al-Pd-Co. There was shown that the ϵ_n -phase, occurring in the above alloys, loses aluminium at the potentiodynamic polarisation (so-called de-alloying). During oxidation at temperatures 500-900°C, the Al₂O₃ layer has grown on surface of Al-Co alloys, following the parabolic law. Corresponding rate constants were found to be temperature dependent.