



Témy dizertačných prác

Spolupracujúca fakulta: **Materiálovotechnologická fakulta STU**
Akademický rok: **2021/2022**
Študijný odbor: **36 Strojárstvo**
Študijný program: **Progresívne materiály a materiálový dizajn**
Dĺžka štúdia: **4 roky**

Téma 1: **Koncept diboridových supermriežok so zlepšenou lomovou húževnatosťou**

Školiteľ: **doc. Ing. Marián Mikula, PhD.** (marian.mikula@savba.sk)

Dizertačná práca sa zaoberá zlepšovaním lomovej húževnatosti v inherentne tvrdých a krehkých diboridových vrstvách pripravených PVD technikami. Tieto keramické vrstvy na báze diboridov tranzitívnych kovov (TMB_2), najmä TiB_2 , ZrB_2 a TaB_2 , sú všeobecne charakteristické nanokompozitným charakterom, kde TMB_2 nanofilamenty sú obklopené tenkou, amorfnou bórovou fázou. Takáto nanoštruktúra vedie k excelentným mechanickým vlastnostiam, najmä extrémne vysokej tvrdosti $H > 40$ GPa. Žiaľ, diboridy sú charakteristické aj nízkou lomovou húževnatosťou, ktorá je definovaná ako schopnosť materiálu odolávať inicializácii trhlín, ktoré sa ďalej šíria a spôsobujú lom. Veľmi sľubným konceptom zlepšovania lomovej húževnatosti sa zdá byť formovanie supermriežok počas rastu vrstiev, čo sa osvedčilo vo vrstvách na báze nitridov prechodových kovov (TMNs). Super mriežky sú tvorené veľmi tenkými diboridovými vrstvami, (napr. TiB_2 - TaB_2) s hrúbkou niekoľkých nanometrov, ktoré na sebe periodicky rastú. Rozdielne mriežkové parametre a moduly pružnosti v šmyku spôsobujú zoslabnutie šírenia trhlín a ich vychýlenie na rozhraní medzi vrstvičkami, čo sa prejaví zvýšenou lomovou odolnosťou.

Na prípravu vybraných tvrdých vrstiev budú v práci použité moderné prístupy vo fyzikálnej depozícii z pár, najmä magnetronové naprašovanie. Okrem merania mechanických vlastností vrstiev nanoindentačnými technikami budú skúmané ich ďalšie dôležité vlastnosti súvisiace s mechanickým správaním sa tvrdých diboridových vrstiev použitím viacerých analytických metód: teplotná stabilita vytvorených nanoštruktúr, ich dekompozičné mechanizmy, formovanie metastabilných a stabilných fáz, oxidačná odolnosť pomocou skenovacieho elektrónového mikroskopu (SEM), energeticko-disperzívnej röntgenovej spektroskopie (EDS), vlnovo-disperzívnej röntgenovej spektroskopie (WDS), ultrafialovej fotoelektrónovej spektroskopie (UPS), röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS), röntgenovej difrakčnej analýzy (XRD), transmisnej elektrónovej mikroskopie (TEM) a ďalších. Vyhodnocovanie lomovej húževnatosti sa bude uskutočňovať pomocou pikoindentoru v SEM na votknutých nosníkoch pripravených fokusovaným iónovým zväzkom (FIB).

V dizertačnej práci budú tiež použité ab initio kalkulácie na predikciu a lepšie pochopenie mechanického správania sa vrstiev a interpretáciu dosiahnutých výsledkov.

Literatúra

1. M. Mikula, S. Uzon, T. Hudec, B. Grančič, M. Truchlý, T. Roch, P. Švec jr., L. Satrapinskyy, M. Čaplovičová, G. Greczynski, I. Petrov, M. Odén, P. Kúš, D. G. Sangiovanni: Thermally induced structural evolution and age-hardening of polycrystalline $V_{1-x}Mo_xN$ ($x \sim 0.4$) thin films, *Surface and Coatings Technology*, 405, 126723 (2021)
2. N. Koutná, A. Brenner, D. Holec, P. H. Mayrhofer: High-throughput first-principles search for ceramic superlattices with improved ductility and fracture resistance, *Acta Materialia* 206, 116615, (2021)

3. V. Šroba, T. Fiantok, M. Truchlý, T. Roch, M. Zahoran, B. Grančič, P. Švec jr., Š. Nagy, V. Izai, P. Kúš, M. Mikula: Structure evolution and mechanical properties of hard tantalum diboride films, *Journal of Vacuum Science and Technology A*, A38 033408 (2020)
4. M. Mikula, B. Grančič, P. Švec jr., T. Roch, M. Truchlý, O. Kohulák, L. Satrapinskyy, T. Fiantok, V. Izai, M. Haršáni, L. Orovčík, P. Kúš: Thermally-induced structure evolution in ternary $Ti_{1-x}Y_xB_{2+\Delta}$ films, *Scripta Materialia* (2019) 91-95

Téma 2: Vplyv vodíka na deformačné správanie a lom komplexných koncentrovaných zliatin

Školiteľ: **Ing. Juraj Lapin, DrSc.** (juraj.lapin@savba.sk)

Vodík je kľúčovou prioritou európskej stratégie pre čistú energiu a kovové materiály predstavujú základný pilier očakávaných technických riešení a inovácií pri jeho výrobe, skladovaní, distribúcii a konečnom použití. PhD práca bude zameraná na skúmanie vplyvu vodíka na deformačné správanie a lom komplexných koncentrovaných zliatin (CCA) typu Co-Cr-Fe-Ni. Doktorand/ka sa bude podieľať na metalurgickej príprave zliatin požadovaného chemického zloženia, charakterizovaní ich mikroštruktúry a skúmaní vplyvu vodíka na ich deformačné správanie pri izbových a nízkych teplotách. Bude skúmať deformačné správanie CCA v priebehu skúšok v ťahu, tlaku, skúšok lomovej húževnatosti a rázovej lomovej húževnatosti. Pomocou metódy konečných prvkov a programu ANSYS bude simulovať deformačné správanie skúmaných CCA, určí kritické lokálne napätia a kritické lokálne deformácie v oblasti vrubu potrebné na iniciáciu a šírenie trhliny. Numerické výpočty bude verifikovať experimentálne. Od uchádzača/ky sa vyžaduje experimentálna zručnosť, poznatky z aplikovanej mechaniky, základné poznatky z náuky o materiáloch, vedomosti o mechanickom skúšaní materiálov, poznatky o numerických metódach výpočtu ako aj dobrá znalosť anglického jazyka.

Téma 3: Vývoj nového biomedicínskeho kompozitu s Ti (TNTZ) maticou a biodegradovateľnou zložkou (Zn, Mg, Ca) s nízkym modulom elasticity a zvýšenou povrchovou bioaktivitou

Školiteľ: **Martin Balog, PhD.** (martin.balog@savba.sk)

Školiteľ špecialista: Ing. Peter Krížik, PhD.

Cieľom doktorandskej práce je vývoj nového objemového kompozitného materiálu s Ti (TNTZ) maticou a biodegradovateľnou zložkou (Zn, Mg, Ca) s extrémne nízkym modulom elasticity pre aplikáciu permanentných intenzívne a cyklicky zaťažovaných biomedicínskych implantátov. Vyvinutý materiál má za úlohu minimalizovať základné nedostatky súčasných Ti implantátov a to mechanickú nekompatibilitu (tzv. stress-shielding efekt) a nedostatočnú povrchovú bioaktivitu. Počas interdisciplinárnej práce bude doktorand zodpovedný za: i) optimalizáciu technológie prípravy kompozitu technológiami práškovej metalurgie a hydrostatického prietlačného lisovania, ii) komplexnú mikroštruktúrnú charakterizáciu, iii) optimalizáciu chemického zloženia TNTZ matrice a určenie vplyvu biodegradovateľnej zložky vzhľadom na mechanické a únavové vlastnosti, iv) určenie koróznej odolnosti a rýchlosti degradácie sekundárnej zložky v simulovanom fyziologickom roztoku, v) in-vitro štúdie odozvy bunkových kultúr t.j., životaschopnosť, proliferácia, DNA degradácia, oxidačný stres optimalizovaného kompozitu. Na doktoranda budú kladené nároky na experimentálny ako aj analytický typ výskumu. Doktorand bude musieť zvládnuť rôzne technológie práškovej metalurgie, bude využívať metódy termickej analýzy (TGA, DSC) a elektrónovej mikroskopie (SEM, TEM), spektrometrické metódy (EBSD, EDS), röntgenovú difrakciu (XRD), mechanické (ťahové skúšky, DMA) a únavové skúšky, bude spolupracovať pri návrhu a interpretácii in-vitro experimentov biologickej odozvy bunkových kultúr (MTT). Doktorandská práca bude podporená projektom aplikovaného výskumu a študent bude úzko spolupracovať s BMC SAV a viacerými zahraničnými pracoviskami. Nutnosťou je predchádzajúca skúsenosť s

daným typom materiálového výskumu, plynulá a aktívna znalosť anglického jazyka, schopnosť pracovať v dynamickom kolektíve a samostatnosť.

Téma 4: Zmeny mikroštruktúry rozhrania kompozitných materiálov na báze medi s uhlíkovým skeletom pripravených tlakovou infiltráciou

Školiteľ: **Ing. Jaroslav Kováčik, PhD.** (jaroslav.kovacik@savba.sk)

Cieľom PhD práce je skúmanie vplyvu parametrov technológie, meranie, a modelovanie vlastností kovových kompozitných materiálov pripravených metódou infiltrácie roztaveného kovu do pórovitých predforiem. Skúmané budú kompozity s kovovou maticou na báze medi vystuženou uhlíkovým skeletom.

Vyhodnocovať sa budú aj objemové zmeny z dôvodu zmršťovania v priebehu kryštalizácie a sťahovania v priebehu chladnutia. Preto bude v rámci práce potrebné vykonať ab initio výpočty chemického zloženia zliatin vhodných na infiltráciu, ktoré by mali potenciál splniť požiadavky malých objemových zmien. Takto vybrané systémy sa následne použijú na prípravu kompozitných materiálov metódou infiltrácie roztaveného kovu do pórovitých vzoriek z uhlíkových skeletov. Optimalizovať sa následne budú technologické parametre procesu výroby, hlavne teplota a čas infiltrácie. Tiež sa bude meniť chemické zloženie kovovej matrice, do ktorej sa budú pridávať rôzne prvky vo veľmi malých množstvách podľa toho aký typ karbidotvornej reakcie má prebehnúť na rozhraní a aké rozhranie sa má vytvoriť. Bude sa skúmať štruktúra a zloženie rozhrania pomocou elektrónovej a podľa potreby aj transmisnej elektrónovej mikroskopie. Sledovať sa bude vplyv vytvoreného rozhrania na mechanické a termofyzikálne vlastnosti kompozitu.