



Žiadateľ: Slovenská technická univerzita v Bratislave

Projekt: Vedomostná fakulta pre hospodársku prax

ITMS kód projektu: 26110230113

Aktivita: 3.2

Zodpovedná za aktivitu: PhDr. Kvetoslava Rešetová, PhD.

PROFILOVÁ PREDNÁŠKA ÚSTAVU VÝSKUMU PROGRESÍVNYCH TECHNOLOGIÍ

Názov aktivity	Aktivita 3.2 Tvorba nástrojov na transfer poznatkov do výučby.
Názov špecifického cieľa	3. Tvorba nástrojov pre transfer poznatkov vo výučbe.
Cieľ aktivity	Aktivita tvorby nástrojov na transfer poznatkov do výučby uzatvára tok informácií získaných z analýzy, mapovania prostredia vplyvu a nastavuje konkrétne nástroje na transfer týchto poznatkov do výučby. Jej cieľom bude vytvoriť súbor nástrojov na odovzdanie poznatkov získaných z predchádzajúcich aktivít do výučby na fakulte a tým zvýšiť vedomostný základ cieľovej skupiny. Cieľ aktivity sleduje funkcionality prenosu špičkovej odbornosti pre cieľovú skupinu.
Termín realizácie aktivity	10/2013 – 09/2015

Z opisu projektu – výber časti aktivity 3.2 : 1. Nástroj na transfer poznatkov – profilové prednášky výskumu

Obsahovo je vedeckovýskumná činnosť fakulty orientovaná najmä na nasledovné oblasti:

- oblasť materiálového výskumu s orientáciou na výskum, vývoj a technologické spracovanie hlavných druhov technických materiálov,
- výskum a vývoj nových technológií priemyselnej výroby, orientovaných najmä na technologické spracovanie moderných technických materiálov a ekologicky čisté produkcie,
- oblasť identifikácie, automatizácie a riadenia procesov, ako aj informačného zabezpečenia technologických, výrobných a organizačných systémov,
- oblasť výskumu a verifikácie princípov manažérskeho riadenia a jeho organizačné štruktúry,
- oblasť riadenia kvality a certifikácie procesov a výrobkov,
- oblasť bezpečnosti a spoľahlivosti technologických zariadení a systémov s dôrazom na metódy analýzy a syntézy systémov.

Definovaná charakteristika výskumu reflektuje na oblasti výskumu fakulty, podlieha hodnotiteľským procesom na fakulte. **Poznanie výskumného profilu, jeho identifikácia a zaznamenanie novým spôsobom by bolo obsahom profilových prednášok.** Z každej oblasti by bola zabezpečená prednáška špičkového odborníka z fakulty, ktorý by priblížil výskumnú charakteristiku, základný obsah výskumu a vývoja, ucelený pohľad na vedecko-výskumný profil ústavu fakulty (fakulta má 6 ústavov) v slovenskom i anglickom jazyku. Príprave (metóde realizácie) profilových prednášok by podliehalo: spracovanie textu v rozsahu adekvátnych autorských hárkov, preklad textu, licenčné podmienky pre použitie diela s autorom prednášky. Takto vytvorené profilové prednášky by mohli byť významným materiálom pre :

- výučbu na fakulte v jej prierezových predmetoch
- prezentáciu ústavu doma i v zahraničí
- rozšírenie mediálneho priestoru pre reprezentačné účely celého projektu
- inovatívnym spracovaním obsahu výskumu na fakulte.

Definované výstupy z aktivity v opise projektu:

Základ pre výstupy tejto aktivity budú determinované úspešnosťou dosiahnutia realizácie aktivít projektu a to najmä aktivít: zo stakeholderingu – aktivita 1.1, z portálu firiem z aktivity 2.1, z realizácie aktivity 3.1 zo získaných e-. Práve táto prepojenosť jednotlivých aktivít a prietok informácií a väzieb medzi nimi môžu infikovať úspešnosť transferu poznatkov do výučby. Všetko, čo bude možné dosiahnuť v predchádzajúcich aktivitách sa zúročí v tejto záverečnej aktivite, ktorá má byť priestorom pre odovzdanie poznatkov, zvýšenie vedomostného základu a prostredím pre naplnenie hlavného cieľa projektu. Konkrétnymi výstupmi aktivity teda budú:

- **6 profilových prednášok mapujúcich vedecko-výskumný charakter šiestich ústavov fakulty, ktoré budú využiteľné nielen vo výučbe, ale budú mať aj silný prezentačný význam pre celú fakultu**
- zabezpečenie min. 30-tich virtuálnych nahrávok technologických postupov z vonkajšej hospodárskej praxe s využiteľnosťou vo výučbe, t. z. rozšírenie škály informácií pre doktorandov fakulty z aplikačnej roviny

- zabezpečenie min. 30-tch virtuálnych nahrávok technologických postupov a procesov na fakulte s cieľom využitia vo výučbe na fakulte a súčasne pre porovnávanie technologických procesov a získaných teoretických vedomostí z výučby na fakulte s poznatkami získanými v praxi
- 4 odborné prednášky pre doktorandov (ale i širší záujem výskumných pracovníkov fakulty), ktoré formujú vedomostný základ cieľovej skupiny v 4 zásadných okruhoch vedeckej práce.

Realizácia aktivity:

1. V súlade s cieľmi projektu bola uvedená aktivita predstavená riaditeľom ústavov MTF STU: **príloha 1**: Informácia pre ústavy z 12.12.2013 , **príloha 2** : List riaditeľom ústavov MTF zo dňa 21.1.2014
2. Riaditelia ústavov písomne delegovali zástupcu za ústav, ktorý bude zodpovedný za realizáciu profilovej prednášky – listy riaditeľov v archíve projektu u zodpovednej riešiteľky
3. Osobitné stretnutia zodpovednej riešiteľky s určenými pracovníkmi o štruktúre a obsahu profilových prednášok
4. Zber údajov, úprava textov, grafické spracovanie prednášok
5. Zabezpečenie prekladov textov
6. Finálne zostavenie prednášok do zborníka vedeckých prác v elektronickej podobe
7. Zverejnenie profilových prednášok

Garanti spracovania profilových prednášok:

Za Ústav materiálov – Mgr. Marián Palcut, PhD.

Za Ústav výrobných technológií – doc. Ing. Erika Hodúlová, PhD.

Za Ústav priemyselného inžinierstva a manažmentu – doc. Ing. Helena Makýšová, PhD.

Za Ústav bezpečnosti, environmentu a kvality – prof. Ing. Maroš Soldán, PhD.

Za Ústav aplikovanej informatiky, automatizácie a mechatroniky – prof. Ing. Pavol Tanuška, PhD.

Za Ústav výskumu progresívnych technológií – doc. Ing. Maximilián Strémy, PhD.

Úvod

Odborné zameranie výskumnej činnosti na MTF STU v Trnave vychádza z profilu fakulty v pedagogickej oblasti, je v súlade s dlhodobým zámerom rozvoja Slovenskej technickej univerzity v Bratislave a pokrýva celé spektrum vzdelávacieho pôsobenia na MTF STU. Výskumná činnosť tvorivých pracovníkov MTF STU sa realizuje formou:

- projektov základného výskumu, podporovaných grantovou agentúrou VEGA,
- projektov aplikovaného výskumu s podporou grantovej agentúry KEGA,
- projektov, riešených v rámci medzinárodných programov,
- projektov medzinárodnej vedecko-technickej spolupráce,
- projektov základného a aplikovaného výskumu s podporou grantovej agentúry APVV,
- zmluvného výskumu a vývoja (obchodné zmluvy).

1. Veda a výskum na MTF

Priority výskumu a vízia MTF STU

Cieľom Materiálovotechnologickej fakulty STU v Bratislave so sídlom v Trnave je, v kontexte s víziou STU, byť **výskumne orientovanou a medzinárodne uznávanou fakultou** v rámci fakúlt podobného zamerania vo svetovom meradle t.j. fakúlt, ktoré rozvíjajú moderné trendy vo výskume a priemyselnej výrobe, s dôrazom na progresívne materiály, sofistikované výrobné technológie a priemyselné inžinierstvo, automatizáciu a informatizáciu výrobných a technologických procesov ako aj kvalitu, bezpečnosť, environmentálne a manažérske aspekty priemyselnej produkcie.

Poslanie MTF STU

V súlade s definovaným poslaním Slovenskej technickej univerzity chce Materiálovotechnologická fakulta STU ako univerzitná fakulta aktívne prispievať k jeho naplneniu - **s prioritou na materiálové vedy a výrobné technológie** - v akreditovaných oblastiach výučby, vedy a výskumu v rámci stanovených kompetencií:

- ponúkať a realizovať univerzitný systém vzdelávania vo všetkých stupňoch v akreditovaných študijných programoch,
- šíriť, prehľbovať a rozvíjať poznanie nástrojmi vedy a výskumu,
- zabezpečiť prenos výsledkov vedy a výskumu do procesu vzdelávania,
- zabezpečiť transfer výsledkov vedy a výskumu do podnikateľskej praxe,
- chrániť výsledky svojho výskumu,
- začleniť sa do univerzitného systému celoživotného vzdelávania,
- podieľať sa na dlhodobo udržateľnom rozvoji spoločnosti všetkými svojimi aktivitami, ale hlavne rozvíjaním harmonickej osobnosti študenta v kontexte ideálov humanizmu a demokracie.

Generálne a strategické ciele pre výskum

1. Publikovať výsledky výskumu a tvorivej činnosti v medzinárodnom prostredí, najmä v renomovaných medzinárodných vedeckých časopisoch.
2. Posilniť postavenie MTF STU v projektoch medzinárodnej spolupráce.

3. Budovať výskumnú infraštruktúru (prístrojovú) vrátane kvalifikovanej obsluhy.
4. Posilniť spoluprácu s praxou od súkromných priemyselných podnikov až po verejné inštitúcie a authority.
5. Zamerať výsledky výskumu a slobodného bádania aj na výstupy vo forme patentov.
6. Posilniť orientáciu na iné ako dotačné zdroje zo štátneho rozpočtu, najmä na zdroje zo zahraničia, z grantových agentúr na projekty, z podnikateľskej činnosti

Zameranie výskumnej činnosti je orientované na:

Výskumná činnosť tvorivých pracovníkov MTF STU sa realizuje formou:

- projektov základného a aplikovaného výskumu a rozvoja,
- projektov riešených v rámci medzinárodných programov,
- projektov medzinárodnej vedecko-technickej spolupráce,
- zmluvného výskumu a vývoja (obchodné zmluvy).

Obsahovo je vedeckovýskumná činnosť fakulty orientovaná najmä na nasledovné oblasti:

- oblasť materiálového výskumu s orientáciou na výskum, vývoj a technologické spracovanie hlavných druhov technických materiálov,
- výskum a vývoj nových technológií priemyselnej výroby, orientovaných najmä na technologické spracovanie moderných technických materiálov a ekologicky čisté produkcie,
- oblasť identifikácie, automatizácie a riadenia procesov, ako aj informačného zabezpečenia technologických, výrobných a organizačných systémov,
- oblasť výskumu a verifikácie princípov manažérskeho riadenia a jeho organizačné štruktúry,
- oblasť riadenia kvality a certifikácie procesov a výrobkov,
- oblasť bezpečnosti a spoľahlivosti technologických zariadení a systémov s dôrazom na metódy analýzy a syntézy systémov.

2. Profilová prednáška Ústavu výskumu progresívnych technológií

2.1 História ústavu

Ústav výskumu progresívnych technológií je najmladším ústavom na Materiálovotechnologickej fakulte STU so sídlom v Trnave. Jeho vznik bol podmienený budovaním Univerzitného vedeckého parku v Trnave. K založeniu ústavu prišlo v roku 2013 s pôvodným názvom Výskumné pracovisko progresívnych technológií (VPPT). Súčasný názov má pracovisko od r. 2015.

Prvé aktivity pracoviska boli zamerané na zabezpečenie vzdelávacieho programu Rozvoj ľudských zdrojov v oblasti výskumu a vývoja pre Pracovisko materiálového výskumu UVP-CAMBO. V októbri 2013 bolo vyslaných 14 výskumných pracovníkov (vedeckých pracovníkov a operátorov) do Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf (Nemecko) na dvojročný vzdelávací program. Cieľom tohto programu bola výchova a príprava odborníkov orientovaných na materiálový výskum a riešenie projektov zameraných na využitie iónových zväzkov. Počas vzdelávacieho programu absolvovali odborné prednášky, on site tréningy na unikátnych zariadeniach tak, aby boli schopní pokračovať vo vedeckej práci na Pracovisku materiálového výskumu Slovakion UVP.

2.2 Charakteristika ústavu

Novovybudovaný Ústav výskumu progresívnych technológií (ATRI -Advance Technologies Research Institute) je zameraný predovšetkým na materiálové inžinierstvo v oblasti iónových a plazmových technológií, automatizáciu a informačné a komunikačné technológie, ďalej v oblasti chémie, fyziky a astrofyziky alebo v oblasti výskumu vôbec, napr.: nanotechnológie a nanoštruktúry, senzorika, špecifický hardvérový a softvérový vývoj, bioinžinierstvo a zdravie, počítačové videnie a spracovanie obrazov, big data, humanoidy, simulácia a modelovanie. Ústav je primárnym užívateľom prostriedkov a technológií Univerzitného vedeckého parku CAMBO v Trnave, vybudovaného zo ŠF SR v celkovej hodnote 42 mil. EUR.

Ambíciou ústavu je v čo najkratšej dobe sa zaradiť do medzinárodnej siete výskumných zariadení a medzi uznávané výskumné pracoviská v danej oblasti. Medzinárodne integrovaný špičkový výskum bude základom aplikovaného výskumu a prenosu nových technológií do priemyslu. V úzkej spolupráci najmä s regionálnym priemyslom chce rozvinúť činnosti podporujúce zavádzanie inovácií do praxe.

Prvým krokom k naplneniu uvedeného cieľa je realizácia medzinárodných vedecko-výskumných projektov. Z tohto pohľadu je ústav úspešný – za prvý rok existencie participoval v niekoľkých medzinárodných návrhoch projektov, pričom ako koordinátor získal EU financovanie prvej fáze projektu “SlovakION - Slovak Centre of Excellence in Ion Beam and Plasma Technologies for Materials Engineering and Nanotechnology” v rámci výzvy Teaming - Horizon 2020 pre obdobie 2015 - 2016. Zároveň sa podarilo podpísať niekoľko medzinárodných zmlúv, napr. so špičkovým výskumným pracoviskom v oblasti iónových technológií Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf. Ústav bol tiež aktívny aj úspešný v národných projektoch (VEGA, APVV).

Popri vzdelávaní 3. stupňa vysokoškolského štúdia v oblasti svojho pôsobenia ponúka Ústav výskumu progresívnych technológií aj odbornú výchovu pre pracovníkov z priemyselnej praxe s cieľom podporiť transfer a zavádzanie inovácií v priemysle Slovenska a zároveň tak podporiť aj ekonomický rast nášho EU regiónu.

2.3 Pracoviská ústavu

Organizačne sa Ústav výskumu progresívnych technológií delí na vedecké centrá:

- Vedecké centrum materiálového výskumu
- Vedecké centrum automatizácie, informačných a komunikačných technológií

2.4 Vedecké centrum materiálového výskumu

Vedecké centrum materiálového výskumu predstavuje vedecko-výskumnú základňu pre aplikáciu iónových a plazmových technológií vo fyzikálnom a materiálovom inžinierstve a v nanotechnológiách. Je vybavené špičkovými technológiami na modifikáciu a analýzu povrchových, podpovrchových a tenkých vrstiev tuhých látok s využitím pôsobenia urýchlených iónov a plazmy.

Súčasťou Centra materiálového výskumu sú

- pracovisko iónových urýchľovačov,
- pracovisko plazmových technológií
- pracovisko počítačového modelovania vlastností molekúl a ich interakcií
- pracovisko chémie, fyziky a astrofyziky.

2.4.1 Pracovisko iónových urýchľovačov

Jeho cieľom je využitie urýchlených iónov na syntézu, modifikáciu a analýzu materiálov. K dispozícii sú dve kľúčové zariadenia: 6 MV Tandetron - lineárny tandemový urýchľovač iónov a 500 kV iónový implantátor. Pracovný rozsah urýchľujúceho napätia Tandetronu je od 300 kV a implantátora od 20 kV. Je možné urýchľovať takmer všetky prvky, t. j. od vodíka po zlato, okrem inertných plynov. Celkový dosiahnuteľný rozsah energií urýchlených iónov pokrytý týmito dvomi zariadeniami predstavuje interval od 10 keV po 50 MeV. Maximálna dosiahnuteľná energia je selektívna napr. pre vodík je to 12 MeV, pre hélium 18 MeV a pre ťažké prvky ako je zlato až 50 MeV. Transport iónových zväzkov ako aj experimenty sa uskutočňujú v experimentálnych komorách v prostredí vysokého vákua. 6 MV Tandetron sa využíva na:

- analýzu materiálov pomocou interakcie iónových zväzkov s látkou tzv. IBA (Ion Beam Analysis)
- modifikáciu materiálov tzv. IBMM (Ion Beam Modification of Materials)

Na to slúžia aktuálne dve pracovné stanice:

- analytická experimentálna komora a
- vysoko-energetická implantačná komora.

Systém je pripravený na napojenie ďalších iónovodov s pracovnými stanicami a tým na rozšírenie svojej svojich experimentálnych, najmä analytických možností. Systém 500 kV implantátora je primárne určený na iónovú implantáciu

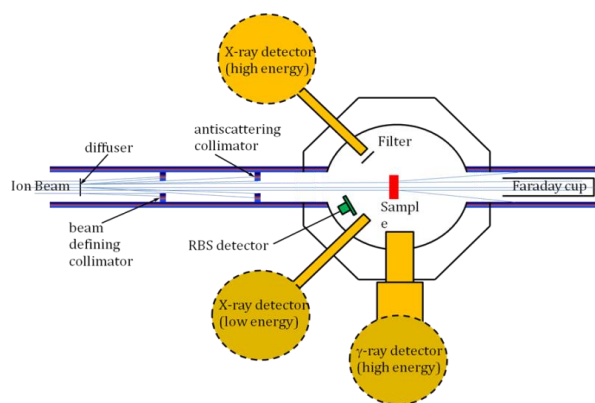
Pracovisko IBA

IBA analýzy pomocou urýchlených iónov považuje za nedeštruktívne. Iónový zväzok s vysokou energiou je veľmi efektívnym nástrojom na skúmanie prvkového zloženia, do určitej miery aj štruktúry povrchových vrstiev materiálov. Urýchlený iónový zväzok je usmernený, fokusovaný, prechádza cez sústavu kolimátorov a dopadá na skúmanú vzorku. Od aplikovanej metódy závisí výber detektora a usporiadanie experimentu. Vzájomným pôsobením dopadajúcich iónov s atómami vzorky dochádza k viacerým fyzikálnym javom. Typický priemer analyzujúceho iónového zväzku sa pohybuje v rozmedzí (2 až 5) mm, typický prúd zväzku býva jednotky

a desiatky nA. Vhodnou kombináciou dopadajúcich iónov, ich energie, uhla dopadu a materiálu vzorky si môžeme vybrať optimálne podmienky na experimentálne zistenie požadovaných informácií o vzorke. Následne podľa toho, akú zložku výstupu tejto interakcie, ktorá je emitovaná zo vzorky detegujeme, hovoríme o nasledovných analytických metódach:

- RBS – Rutherford Backscattering Spectrometry alebo Rutherfordov spätný rozptyl – ak detegujeme energiu spätne rozptýlených iónov
- RBS kanálovanie/blokovanie – ak meriame uhlovú závislosť RBS spektra dopadajúcich/rozptýlených zo vzorky vychádzajúcich iónov vzhľadom na kryštalografické roviny a osi kryštalickej vzorky
- ERDA – Elastic Recoil Detection Analysis alebo Analýza pružne vyrazených iónov – ak detegujeme energetické spektrum vyrazených iónov materiálu vzorky
- PIXE – Proton (Particle) Induced X-ray Emission alebo protónmi (časticami) vybudené rtg. žiarenie – ak detegujeme spektrum charakteristického rtg. žiarenia
- NRA – Nuclear Reaction Analysis alebo analýza pomocou jadrových reakcií – ak detegujeme produkty jadrových reakcií vybudené vo vzorke dopadajúcimi iónmi.

Rozsah analýz je od povrchu do hĺbky typicky mikrometer, špeciálne až desiatky mikrometrov. Je možné skúmať tenké vrstvy aj nanovrstvy. Povrchové hĺbkové rozlíšenie je niekoľko nanometrov. Analytická citlivosť na prímiesne prvky a nečistoty dosahuje úroveň ppm.



The essential parts of the PIXE set-up with other related techniques of IBA (PIGE and RBS).

Obr. IBA

Stručná charakteristika jednotlivých metód

RBS – Rutherfordov spätný rozptyl iónov

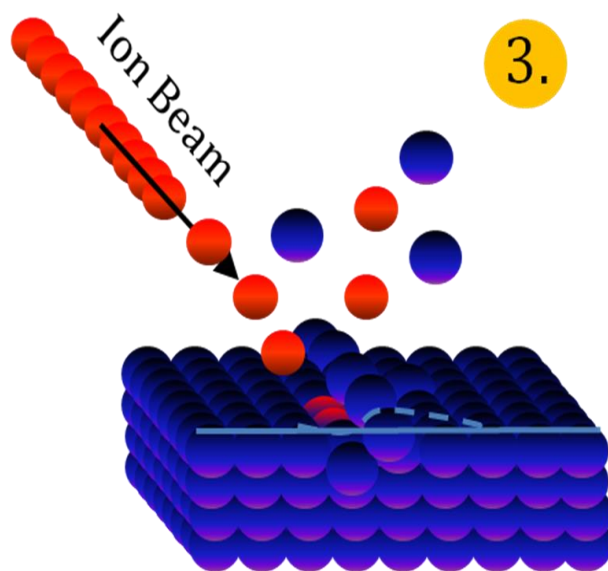
Vzorka sa ostreľuje ľahkými iónmi, najmä héliom s energiou 1 až 3 MeV. Je vysoko citlivá na ťažké prvky v ľahkom substráte. Je to kvantitatívna metóda bez potreby použitia referenčných vzoriek. Pomocou RBS môžeme zmerať:

- hĺbkové koncentračné profily jednotlivých prvkov zastúpených vo vzorke vrátane hĺbkového zastúpenia stopových prímiesí

- hrúbku tenkých vrstiev,
- hĺbkové zloženie rozhraní vrstiev,
- hrúbku amorfnej časti na kryštalickom substráte,
- ale aj difúzny profil, atď.

Je vhodná na analýzu prvkov ťažších ako kyslík. S narastajúcou atómovou hmotnosťou sledovaných prvkov sa citlivosť metódy a zvyšuje. RBS v režime kanálovania/blokovania umožňuje stanoviť parametre kryštálovej mriežky, kvalitu kryštálu, stupeň amorfizácie, polohu prímiesnych prvkov v mriežke (intersticiálnu, substitučnú), atď. RBS je:

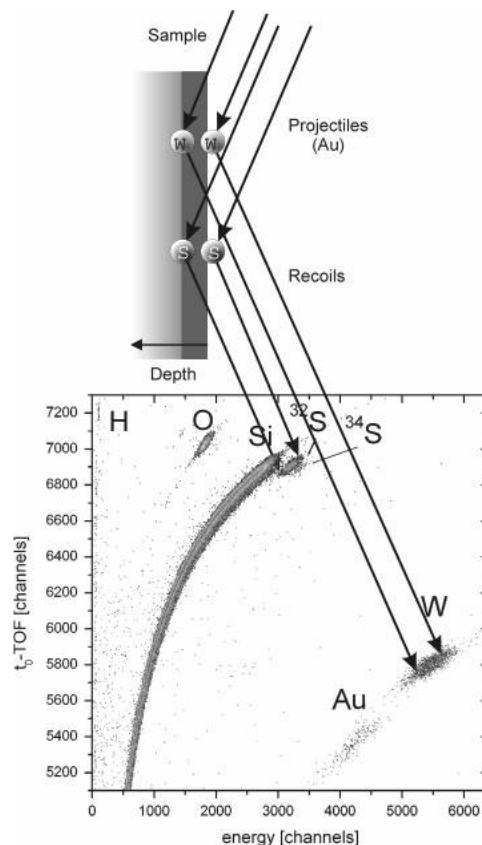
- kvantitatívna metóda
- bez nutnosti použitia referenčnej vzorky
- nedeštruktívna
- má dobré hĺbkové rozlíšenie.



Obrázok „3.ION“

ERDA – analýza pružne vyrazených iónov

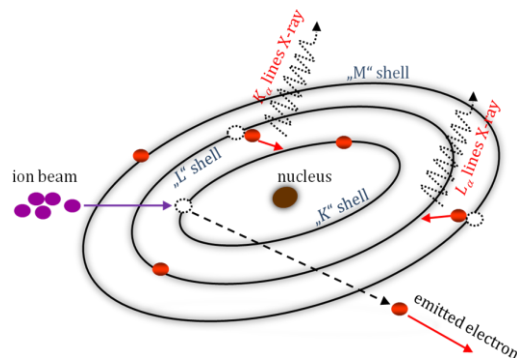
Prednosťou tejto metódy je vysoká citlivosť na ľahké prvky v ťažkých substrátoch. Aktuálne vybavenie laboratória umožňuje merať hĺbkové koncentračné profily vodíka a ľahkých prvkov. Po kompletom vybavení laboratória sa merací rozsah rozšíri aj na ťažšie prvky až po urán.



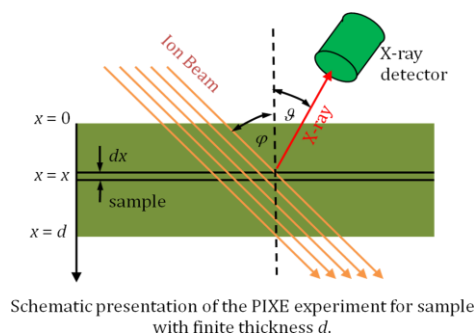
PIXE – Protónmi vybudené rtg. žiarenie

Štandardne sa charakteristické röntgenovské žiarenie vybudzuje pomocou protónového zväzku s energiou (2 až 3) MeV. Protóny pri interakcii s elektrónovým obalom atómu vzorky môžu atóm excitovať – vzbudiť, t. j. jeden z K elektrónov je vyrazený zo svojej hladiny alebo prejde na vyššiu energetickú hladinu. Následne pri návrate atómu do základného energetického stavu môžu byť emitované K, L alebo M rtg. čiary, ktoré sú charakteristické pre každý jednotlivý prvok. Vyhodnotením zosnímaného rtg. spektra je možné stanoviť zloženie vzorky pre prvky s atómovým číslom väčším ako 12 s citlivosťou až ppm. PIXE umožňuje stanovenie stopových množstiev prímiesnych prvkov vo vzorke.

Jedným z často používaným využitím tejto meracej metódy je sledovanie zloženia alebo znečistenia aerosólov vzduchu, kvapalín, sedimentov, geologických vzoriek, ale aj umeleckých diel, malieb a archeologických nálezov, atď.



Principle of PIXE: Example of X-ray emission lines in PIXE



NRA – analýza pomocou jadrových reakcií

Meráciu časť zariadenia pre túto metódu je nutné ešte dobudovať. NRA využíva hlavne rezonančné jadrové reakcie, vyvolané v dôsledku interakcie dopadajúcich iónov jadrami atómov vzorky. Najčastejšie sa registruje gama žiarenie, ako jeden z produktov jadrovej reakcie. Okrem prvkovej analýzy atómov s nízkym Z , umožňuje táto metóda merať napr. profil vodíka s vysokým hĺbkovým rozlíšením.

Simulácie interakcií iónov s látkou

V rámci fyzikálno – materiálového výskumu sa na prípravu ale aj vyhodnocovanie a interpretáciu experimentálnych prác v centre materiálového výskumu využíva aj matematické modelovanie a počítačové simulácie. Používajú sa špeciálne počítačové programy zamerané na modelovanie procesu interakcie iónov s materiálom vzorky ako aj modelovanie následných sekundárnych štrukturálnych zmien v ožarovanom materiáli. Existujú dva odlišné prístupy k riešeniu tohto problému.

- Prvý prístup vychádza z tzv. analýzy binárnych zrážok molekúl (Binary Collision Approximation - BCA). Pri tomto prístupe sa interakcia iónov s látkou považuje za postupnosť zrážok dvojíc častíc. Príklad používaných počítačových programov: TRIM/SRIM, MARLOWE, atď.
- Druhý prístup je založený na klasickej dynamike (Classical Dynamics – CD, Molecular Dynamics - MD), keď sa súbor kolidujúcich častíc považuje za mnohočasticový problém. Napr. programy: MDRANGE, SIMKIT

V rámci útavu sa na simuláciu a vyhodnocovanie výsledkov experimentálnych meraní používajú tiež programy: RUMP, SIMNRA - pre RBS, ERDA a NRA, GUPIX – pre PIXE

Syntézu a modifikáciu materiálov môžeme realizovať pomocou:

- iónovej implantácie
- miešaním iónovým zväzkom

Iónová implantácia

Je proces, pri ktorom je substrát bombardovaný urýchlenými iónmi prímiesi. Jej cieľom je zabudovanie prímiesnych atómov do základného materiálu vzorky. Zmenou energie implantovaných iónov sa mení hĺbka zabudovania prímiesnych atómov. Kombináciou viacerých energií je možné doceliť požadovaný hĺbkový koncentračný profil implantovaného prvku. Energetický rozsah iónovej implantácie je od 20 keV do 50 MeV.

Maximálny priemer implantovaného substrátu je 20 cm pre 500 kV implantátor a 10 cm pre 6 MV Tandetron. Implantovaný substrát je možné chladiť vodou, kvapalným dusíkom alebo vyhrievať.

Miešanie iónovým zväzkom (Ion beam mixing)

je premiešavanie atómov a zlievanie v mieste rozhrania dvoch rôznych materiálov počas ožarovania iónmi. Táto metóda sa využíva najmä pri spájaní nerovnovážnych a metastabilných zliatin a intermetalických zlúčenín.

Aplikácie iónovej implantácie a iónového miešania

Hlavným cieľom je zmena vlastností povrchových a podpovrchových oblastí materiálov. Popri tom, že implantácia je jednou zo základných technológií polovodičového priemyslu, využíva sa aj na zvýšenie odolnosti povrchov voči opotrebeniu, zvýšenie tvrdosti, vytvorenie odolnosti voči oteru, antikorošnej ochrannej vrstvy, biokompatibilného povrchu, ale slúži aj na cielenú modifikáciu elektrických, magnetických, optických aj ďalších fyzikálnych alebo chemických vlastností povrchových vrstiev. Aktuálnou aplikačnou oblasťou je formovanie nanoštruktúr, nanopórovitosti a modifikácia ich vlastností.

Ďalšie aplikačné oblasti využitia iónových technológií:

- Nechránené časti v automobilovom a strojárskom priemysle (vstrekovacie trysky, vačkové hriadele, ložiská ventily a iné);
- Medicínske a biologické aplikácie (protézy z materiálov s pôvodne nedostatočnou oteruvzdornosťou);
- Povrchové nitridovanie nehrdzavejúcich ocelí pomocou iónovej implantácie za účelom vylepšenia ich oteruvzdornosti pri udržaní vysokej korózne odolnosti;
- „Stenty“ (endoluminálne cievkové protézy), nanopórové stenty pre dodatočne ovládané dávkovania liekov, biokompatibilné a krvo-kompatibilné materiály, atď., pre modernú medicínu;
- Ďalšie možnosti iónovej implantácie v priemysle v oblastiach iných než mikroelektronika, ako napríklad presná mechanika, špeciálne konštrukčné časti drahých hodínok;
- Ochrana proti vysoko teplotnej oxidácii (zliatiny TiAl, turbínové konštrukcie);
- Vstrekovanie plastov do foriem (zvyšovanie bezpečnosti pri odstraňovaní súčiastok vytvorených vstriknutím do formy, ako aj ochrana proti oteru pri vysoko namáhaných častiach formovacích nástrojov);
- Iónová implantácia povrchov polymérov pre vylepšovanie niektorých vlastností povrchu, ako elektrickej vodivosti, biokompatibility, atď.

2.4.2 Pracovisko plazmových technológií

Zameranie výskumu na pracovisku:

- *Automobilový priemysel:* Tribologické povlaky pre motory áut a povrchové úpravy komponentov pre vyššiu účinnosť a nižšiu environmentálnu záťaž.
- *Elektronika:* Priehľadné vodivé vrstvy s vylepšenými optickými a elektrickými vlastnosťami.
- *Strojárske a letecký priemysel:* Povrchy s vyššou odolnosťou voči opotrebeniu a tepelnou stabilitou.
- *Biomedicína:* Implantáty s vyššou mierou biokompatibility.

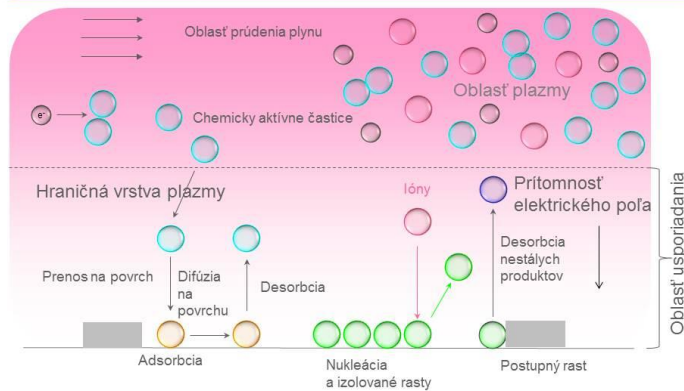
Zameranie výskumu



Interakcia plazmy s povrchom

Schematický obrázok znázorňuje základné procesy v objeme, na rozhraní plazmy a na povrchu vzorky. Ionizované častice sú vytvárané hlavne procesom zrážky elektrónov s neutrálnymi časticami. Aktívne častice vznikajú pri disociácii molekúl zrážkou s elektrónom alebo pri excitovaní do vyšších stavov. Častice sú urýchľované smerom k substrátu elektrickým poľom, ktoré vzniká vďaka rozdielnym potenciálom plazmy a vzorky. Elektrické pole vplýva len na nabité častice (ióny) a podľa energie iónov dochádza k depozícii alebo k leptaniu resp. odprašovaniu.

Interakcia plazmy s povrchom



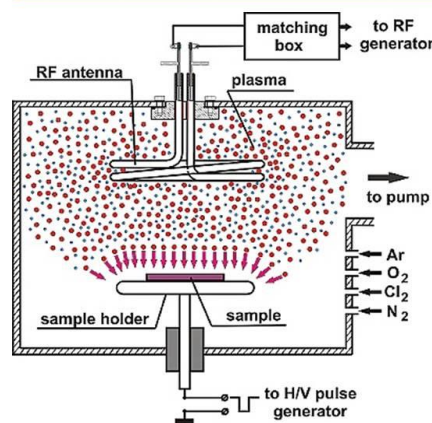
Plazmou podporovaná iónová implantácia

Technika PBII bola vyvinutá v snahe získať vyššie prúdové hustoty iónov, z dôvodu dosiahnutia podstatne kratších časov implantácie, ako aj možnosti implantovania komplikovaných tvarov povrchov, čo nie je možné dosiahnuť pri implantácii pomocou iónového zväzku. Účinnosť PBII je v porovnaní so štandardným implantačným procesom lepšia najmä pre nízkoenergetické implantácie s vysokými dávkami.

Pri PBII je vzorka ponorená v plazme obsahujúcej požadované druhy iónov, kde vysokonapäťové pulzy sú aplikované priamo na substrát. Ióny sú extrahované z plazmy a sú implantované do povrchu materiálu.

Prúdová hustota iónového lúča závisí od parametrov plazmy a predpätia a jeho hodnota je rádovo (1 – 10) mA/cm². Vysoké napätie v impulznom režime sa používa na zníženie teploty substrátu ako aj na kontrolu nabíjania. Typické dĺžky pulzov sú v rozmedzí od 2 do 100 μs pri frekvenciách niekoľko 100 Hz až 3 kHz. Teplota substrátu môže byť kontrolovaná zmenou implantačných parametrov a môže byť v rozmedzí od izbovej teploty do 600°C bez ďalšieho zahrievania. Samoregulačná kontrola náboja dosiahnutá striedavým priťahovaním iónov a elektrónov umožňuje opracovávať nielen vodivé materiály, ale aj izolanty.

Plazmou podporovaná iónová implantácia (PBII)

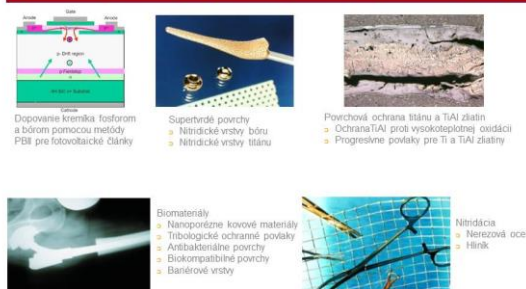


- Pri PBII je
- vzorka ponorená v plazme obsahujúcej požadované druhy iónov
 - vysokonapäťové pulzy sú aplikované priamo na substrát
 - ióny sú extrahované z plazmy a sú implantované do povrchu materiálu.
 - Prúdová hustota je rádovo 1 – 10 mA/cm²
 - Typické dĺžky pulzov sú v rozmedzí od 2 do 100 μs
 - Frekvencie sú niekoľko 100 Hz až 3 kHz
 - Teplota substrátu môže byť v rozmedzí od izbovej teploty do 600°C bez ďalšieho zahrievania.

Aplikácie plazmou podporovanej iónovej implantácie

- Dopovanie kremíka fosforom a bórom pomocou metódy PBII pre fotovoltaičné články
- Supertvrdé povrchy: Nitridické vrstvy bóru a titánu
- Povrchová ochrana titánu a TiAl zliatin: Ochrana TiAl proti vysokoteplotnej oxidácii a progresívne povlaky pre Ti a TiAl zliatiny
- Biomateriály: Nanoporézne kovové materiály, tribologické ochranné povlaky, antibakteriálne povrchy, biokompatibilné povrchy a bariérové vrstvy
- Nitridácia nehrdzavejúcej ocele a hliníka

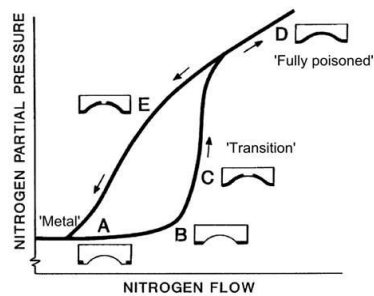
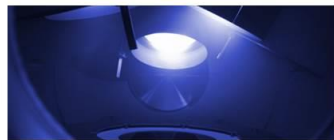
Aplikácie plazmou podporovanej iónovej implantácie (PBII)



Reaktívne magnetrónové naprašovanie

Reaktívne magnetrónové naprašovanie je populárna a osvedčená technika na výrobu tenkých vrstiev a povlakov ako oxidy, nitrídy a karbidy. V rámci procesu plazmovej depozície sú ióny argónu pochádzajúce z plazmového výboja urýchľované smerom ku kovovému terčiku. Dopad iónov na terčik spôsobuje sériu zrážok medzi atómami terčika a dochádza k vyrazeniu týchto atómov. Tento proces vyrážania atómov je známy ako naprašovanie. V režime reaktívnej depozície sa môžu pridať do procesu malé množstvá reaktívneho plynu ako kyslík či dusík. Tieto reagujú s naprašovaným materiálom a vytvárajú požadovanú vrstvu zlúčenín na substráte. Pri tomto procese dochádza k neželanému efektu „otrávenia“ terčika. Akonáhle je reaktívny plyn zavedený do procesnej komory, reaguje aj s povrchmi, ako sú steny komory a odprašovaný terčik. Intenzívna erózia (spôsobená odprašovaním) v magnetrónovom kanáli odďaľuje kompletne „otrávenie“ (vytváranie zmesi) povrchu tohto kanálu. Otrávenie kanálu preto zvyčajne postupuje rôznymi štádiami ako funkcia parciálneho tlaku reaktívneho plynu a času. Počiatočná fáza je čistý kovový kanál terčika (režim „kovového“ odprašovania) a konečná fáza je úplne zreagovaný povrch kanála (režim „zmes“ alebo úplne otrávené odprašovanie). Medzietapy sa nazývajú prechodové oblasti.

Reaktívne magnetrónové naprašovanie

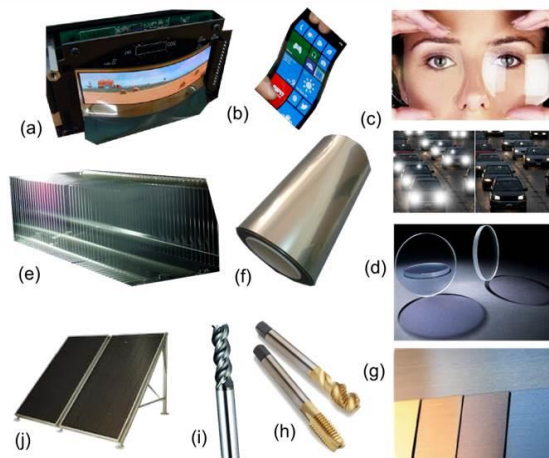


Sproul, W. D. and Tomashek, J. 1983
CA1198084A1

Príklady na reaktívne naprašované povrchy:

- (a) a (b) zariadenia s OLED obrazovkou,
- (c) antireflexné vrstvy,
- (d) prvky laserovej optiky,
- (e) ITO-m pokryté sklo,
- (f) ITO-m pokrytá polymérna sieť,
- (g) dekoratívne oxidové vrstvy,
- (h) závitníky pokryté TiN vrstvou,
- (i) frézovacie nástroje pokryté DLC vrstvou,
- (j) Ti-O-N vrstvou pokrytý tepelný solárny panel.

Aplikácie reaktívneho magnetrónového naprašovania



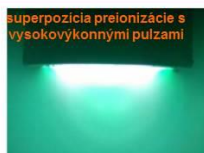
Vysokovýkonné impulzné magnetrónové naprašovanie (HiPIMS)

V porovnaní s jednosmerným magnetrónovým naprašovaním, energia v HiPIMS je sústredená v krátkych pulzoch na dosiahnutie vysokej hustoty plazmy a tým pádom vysoké prúdy iónov smerom na substrát. Stupeň ionizácie naprašovaných iónov je veľmi vysoký až 70%.

Vysokovýkonné impulzné magnetrónové naprašovanie (HiPIMS)

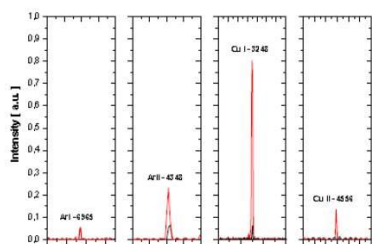


Preionizačný mód (~ 300 V, ~ 4 mA, ~ 1.2 W) (čierna čiara)

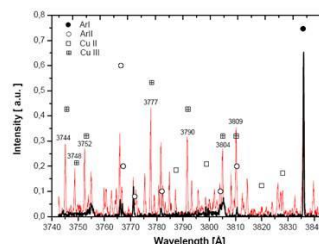


tlak 1.2 Pa, napätie na magnetróne 1.1 kV, trvanie pulzu 10 μ s frekvencia opakovania 30 Hz, (červená čiara)

■ Prítomnosť Cu^{++} indikuje vysoký stupeň ionizácie

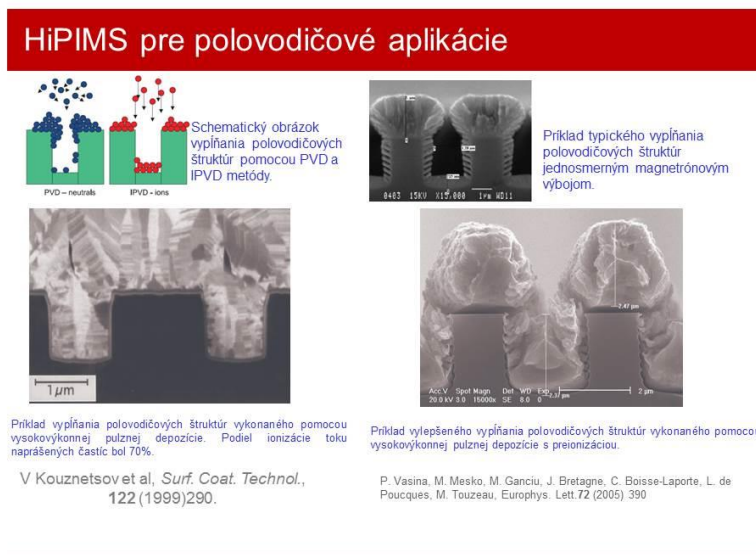


Vasina et al Plasma Sources Sci. Technol 16 (2007)



HiPIMS pre polovodičové aplikácie

- Príklad typického vyplňania polovodičových štruktúr jednosmerným magnetrónovým výbojom.
- Príklad vylepšeného vyplňania polovodičových štruktúr vykonaného pomocou vysokovýkonnej impulznej depozície s preionizáciou.



2.4.3 Pracovisko počítačového modelovania vlastností molekúl a ich interakcií.

V súlade s moderným trendom sa v centre materiálového výskumu využíva matematické a počítačové modelovanie na vyhodnocovanie a interpretáciu experimentálnych prác. Používané prístupy a počítačové programy sú vysvetlené v časti 8 kapitoly o pracovisku iónových urýchľovačov. Zamerané sú na modelovanie procesu interakcie iónov s materiálom vzorky ako aj na modelovanie následných sekundárnych štrukturálnych zmien v ožarovanom materiáli. Špecifické programy sa využívajú aj pri modelovaní interakcií plazmy s povrchom, pri iónových implantáciách a pri riešení iných problémov. Na pracoviskách iónových urýchľovačov a plazmových technológií je počítačové modelovanie zamerané na priamu spoluprácu s experimentom. Cieľom práce pracoviska počítačového modelovania molekúl a ich interakcií je chápanie elementárnych krokov súvisiacich s iónovými a plazmovými technológiami, t.j. výskum procesov na molekulárnej úrovni, najmä na základe poznania a presných predpovedí elektrických, magnetických a optických vlastností atómov a molekúl a ich súvisu s medzimolekulovými interakciami. Niektoré riešené a plánované témy výskumu sú uvedené v nasledujúcich častiach.

Využívať sa budú jednak mnohočasticové ab initio metódy kvantovej chémie, najmä metóda Coupled Clusters, CCSD(T), CASPT2, CI, schopné poskytnúť veľmi presné dáta pre menšie molekuly a atómové či molekulové klastre ale aj metódy založené na funkcionáli hustoty (DFT). V obidvoch skupinách metód sa zahrnú relativistické efekty pre ťažšie atómy.

Počítačové programy, ktoré máme k dispozícii sú najmä MOLCAS, GAUSSIAN, COLUMBUS, DIRAC, VASP a iné.

Neditivita interakčných interakcií pri modelovaní vlastností berýlia

Kovové berýlium je jedným zo základných materiálov, s ktorým sa uvažuje pri konštrukcii stien fúzneho reaktora (plasma – wall material). MTF sa výskumu zúčastňuje v rámci projektu EURATOM. Berylium sa používa na legovanie ocelí, ako materiál aj v kozmickom výskume, resp. ako opto elektronický materiál. V súlade s elektrónovou štruktúrou Be je väzba v najmenšej molekulovej zložke berýlia, molekule Be_2 , mimoriadne slabá (ide o van der Waalovu väzbu). Pritom ako kov je berýlium ľahký a tvrdý materiál. Prechod od molekulových vlastností ku klastrom Be a tuhej látke je preto mimoriadne zaujímavý problém. V rámci projektu EURATOM sme ukázali (M. Šulka, M. Urban a spol., Chem. Phys. Lett. 573, 8-14 (2013)), že už v malých klastroch Be sa väzba mimoriadne zosilňuje vďaka viacčasticovým interakciám. V Be nie je možné použiť párové interakcie ani ako východiskový bod. To má veľký význam pri modelovaní interakcií Be v zmiešaných komplexoch so zložkami ako BeW, BeH, BeC, BeO atd., ktoré sa vyskytujú ako súčasť ďalších materiálov stien reaktora resp. ako znečisťujúce častice a častice unikajúce z vysokoteplotnej plazmy.

Na identifikáciu nečistôt v povrchových vrstvách Be sa používa najmä metóda XPS. Interpretáciu XPS signálu môžu značne uľahčiť teoretické výpočty inner shell ionizačných energií (IE) Be a jeho klastrov. Vzhľadom na viac-časticové efekty nie je možná jednoduchá extrapolácia IE od malých klastrov k makroskopickým vlastnostiam kovového Be (obr. 3). Rovnako dôležité je pochopenie chemických posunov signálu XPS pri ionizácii z 1s orbitalu Be vzhľadom na väzbové pomery v modelových zlúčeninách Be_nH_x , BeO, BeC, Be_2C atd.

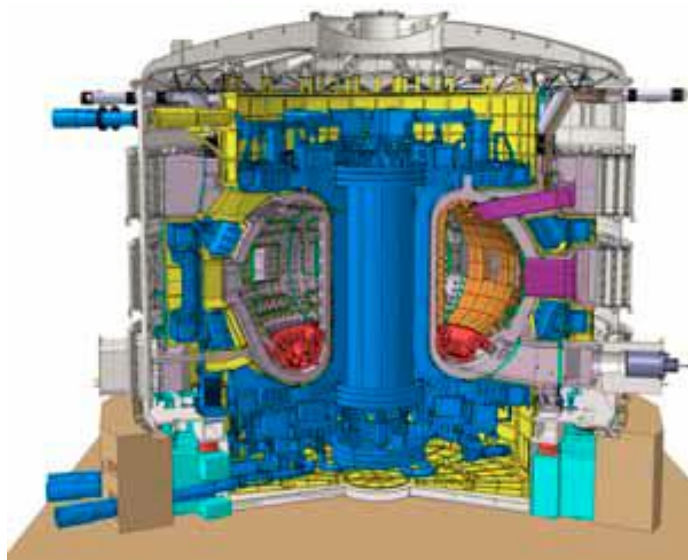


Schéma 1 termonukleárneho fúzneho reaktora

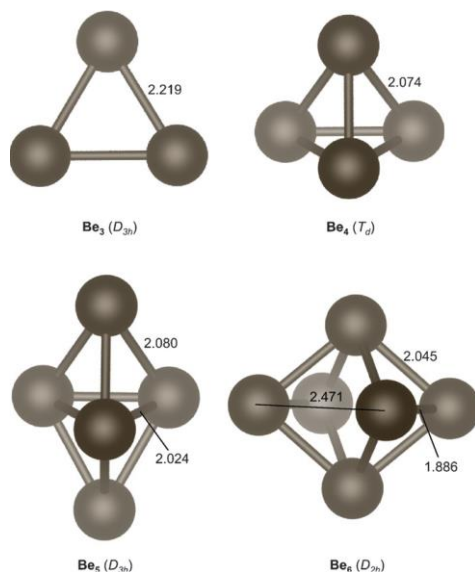
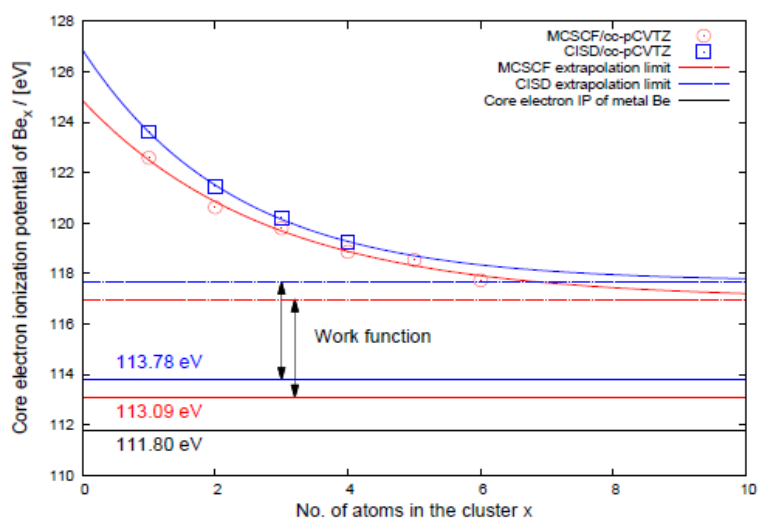


Schéma 2 štruktúry klastrov $\text{Be}_3 - \text{Be}_6$, [M. Šulka, M. Urban a spol., Chem. Phys. Lett. 2013].



△Figure 4: ΔCASSCF and ΔCISD core ionization energies of Be atom and Be_x ($x=2-6$) clusters. The IPs show convergent trend with the increasing cluster size. Simple exponential formula of the form $IP(x) = IP_\infty + c_1 \exp(c_2 x)$ was used to fit these data and obtain the estimated core electron ionization potential of the cluster of infinite size.

Obr. 3. Ionizačné energie 1s pre malé klastre berýlia. [F. Holka, M. Šulka, M. Urban, Annual report 2014, projekt EURATOM]

Nanoklastre mincových kovov a ich interakcie s ligandami.

Špecificky, nanočastice zlata sú obzvlášť užitočné ako chemické katalyzátory alebo urýchľovače rastu iných nanoštruktúr - aplikácie, v ktorých sú veľkosť, štruktúra a zloženie esenciálne. Popri ich využití v katalýze sa s ich aplikáciou uvažuje aj v nanotechnológiách, vývoji pokročilých materiálov, v optických a nelineárnych optických procesoch v molekulových systémoch, v biológii a medicíne. Štúdium princípov interakcie kovov s ligandami vytvára bázu pre pochopenie interakcie kovov s proteínmi až na obrbitálnej úrovni, ktorá môže ďalej slúžiť ako podklad pre dizajn nových metaloproteínov s programovateľnými vlastnosťami. Vzťah medzi štruktúrou a aktivitou určenou vlastnosťami nanočastíc je dôležitý pre ich bezpečné použitie.

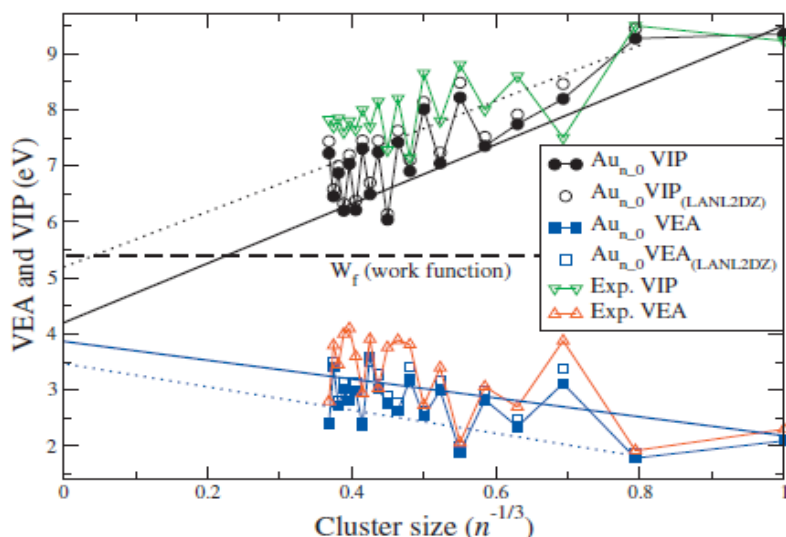
V sérii článkov, ktorá kulminovala podrobnou analýzou interakcie medzi voľným elektrónovým párom ligandu (L) a mincovými kovmi (M) (M. Urban a spol., J. Phys. Chem. A, **117**, 4472, (2013) sme ukázali, že jej hnacou silou je donácia z voľného elektrónového páru kombinovaná spätnou donáciou (najmä v prípade ligandov obsahujúcich atómy P a S).

Vychádzajúc z molekulových dát (ionizačné energie IE ligandov a elektrónové afinity EA klastrov zlata) bolo možné odhadnúť relatívne stability rôznych klastrov. Súčasne sme testovali sériu DFT funkcionálov s cieľom použiť ich vo väčších klastroch až po nanoštruktúry. Takto sa otvára možnosť študovať veľké klastre pomocou DFT s kontrolou presnosti založenou na CC výpočtoch menších komplexov. Je pozoruhodné, že EA klastrov Au_n osciluje s ich veľkosťou (B. Assadollahzadeh, P. Schwerdtfeger; J. Chem. Phys., **131**, 064306, (2009) a vyjadruje špecifické vlastnosti nanoštruktúr podľa ich veľkosti.

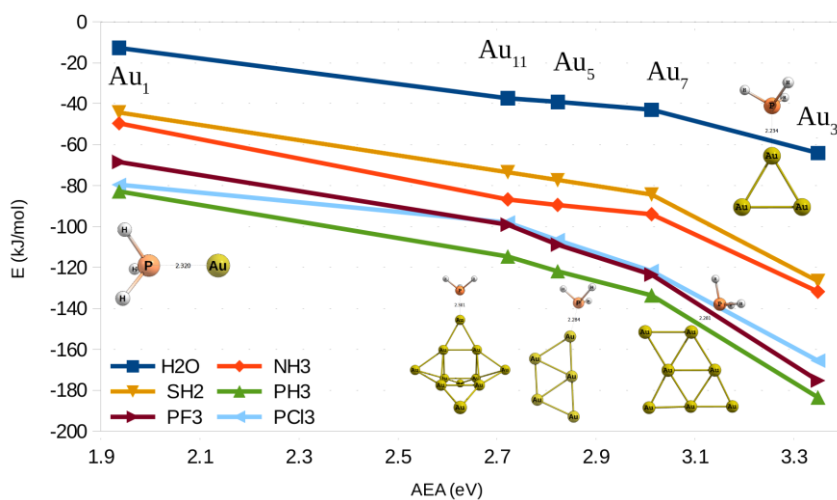
To sa odráža aj v ich interakciách s ligandami – interakčné energie Au_n klastrov s ligandami L budú podobne oscilovať s ich veľkosťou a špecifickou štruktúrou. Predbežné výsledky, potvrdzujúce túto hypotézu sú na obr. 6. Plánujeme tiež rozšíriť počet ligandov v Au_n klastroch na štúdium modelu $Au_n - L_m$ s cieľom formulovať všeobecné pravidlá pre predpoveď stability týchto klastrov, ktorá korešponduje s ich veľkosťou až po nanorozmer.

Okrem interakcie voľných elektrónových párov sa sústredíme aj na ligandy s otvorenou valenčnou sférou (tzv.- SCX3, základné články pri tvorbe samoorganizujúcich monovrstiev, self assembled monolayers, SAMS), napríklad ligand CH_2 . Zaujímavé sú optické vlastnosti (najmä polarizovateľnosti) klastrov Cu-L, Ag-L, Au-L (M-L). Budeme testovať predpoklad, že počas M-L interakcie sa zvýši polarizovateľnosť komplexu ako dôsledok prenosu náboja a že táto zmena bude úmerná sile "väzby".

Bude zaujímavé preveriť, či a ako môže byť tento jednoduchý vzťah ovplyvnený spätnou donáciou.



Obr. 5. Oscilácie elektrónových afínit a ionizačných energií s veľkosťou klastrov Au_n [Swerdtfeger a spol. J. Chem. Phys., 131, 064306, 2009]



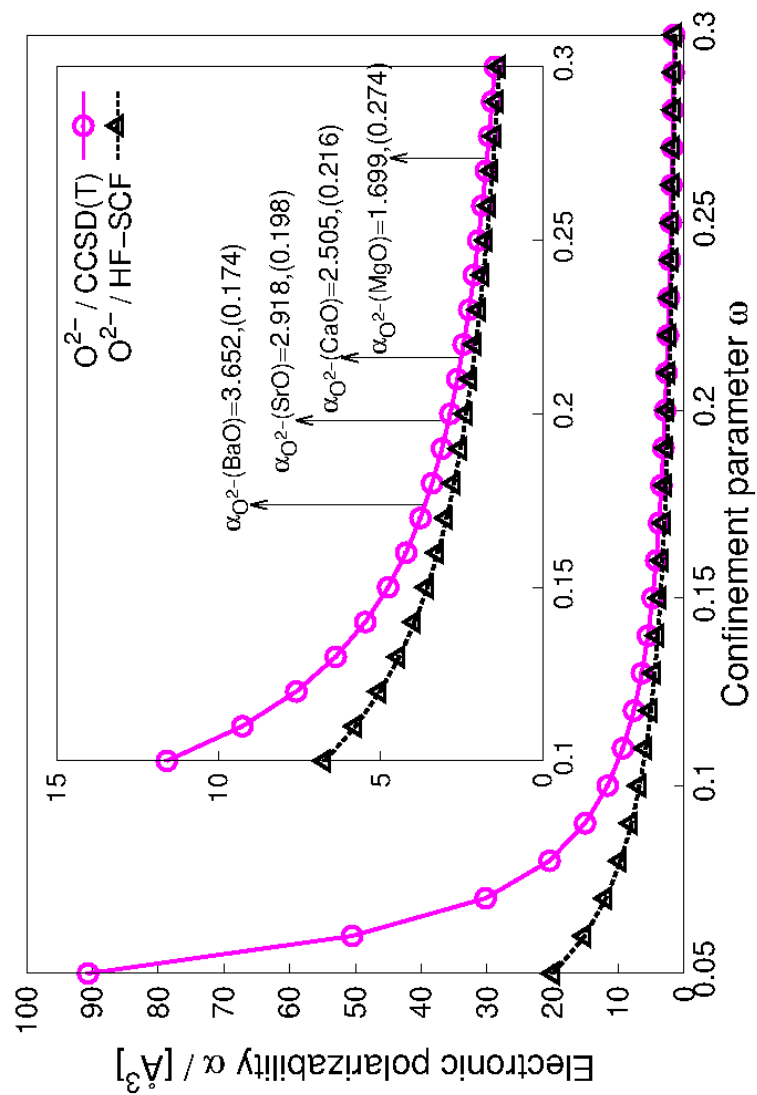
Obr. 6. Interakčné energie ligandov s klastrami Au_n a ich závislosť od elektrónovej afinity klastra Au_n . [M. Urban a spol., Internat. Congress of Quantum Chem. Peking, 2015].

Cofinement – model pre výpočty polarizaovateľností iónov v kryštáloch a iných materiáloch.

Pre pochopenie interakcií na povrchoch kryštálov, menovite iónových kryštálov, je podstatné poznanie elektrických vlastností participujúcich iónov v kryštálovej mriežke. Tie sú podstatne iné ako pre izolované ióny. Niektoré ióny, ako napr. anión kyslíka O^{2-} je ako voľná častica nestabilný, ale stabilizuje sa vonkajším prostredím, napr. v iónovom kryštále.

Zmeny v polarizovateľnosti iónov v prostredí sa dajú modelovať použitím externého ohraničujúceho potenciálu, reprezentujúci „confinement“. Plánujeme rozšíriť výpočty „vnútro-kryštálových“ aniónových polarizovateľností („in-crystal polarizabilities“) na katióny v snahe pochopiť makroskopické vlastnosti skiel a kryštálov. Iónové polarizovateľnosti úzko súvisia s dipól-dipólovými disperznými koeficientmi a teda aj van der Waalsovskými

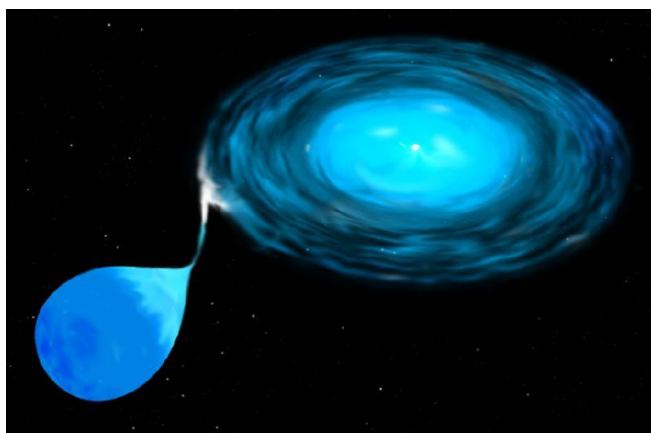
interakciami medzi iónmi. Model „confinementu“ sa dá aplikovať aj na zaujímavú oblasť vývoja a chápania štruktúr ako sú „quantum dots“.



Obr. 7. Polarizovateľnosť aniónu O^{2-} pre rôzne kryštály a jej závislosť od exteného „confining“ potenciálu ω .
[F. Holka, M. Urban, P. Neogrády, J. Paldus, J. Chem. Phys. 141, 214303, 2014].

2.4.4 Pracovisko chémie, fyziky a astrofyziky

Astrofyzikálny výskum na ústave sa zameriava prevažne na štúdium akréčných procesov v niektorých druhoch interagujúcich dvojhviezd. Jedná sa o dvojicu hviezd kde jedna stráca hmotu a tá sa následne nabaľuje na druhý objekt, ktorý je pomerne exotický. Je ním buď takzvaný biely trpaslík, alebo neutrónová hviezda, prípadne totálny exot čierna diera. Predmetom nášho záujmu je proces akým sa táto hmota prenáša z hviezdy na hviezdu.

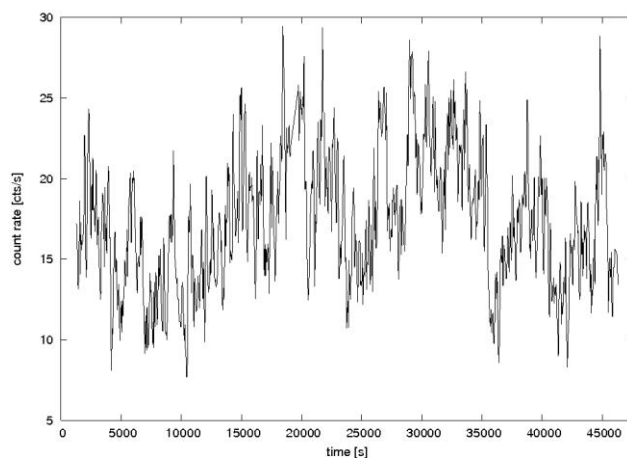


Obr. podľa:

http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Accretion_Disk_Binary_System.jpg

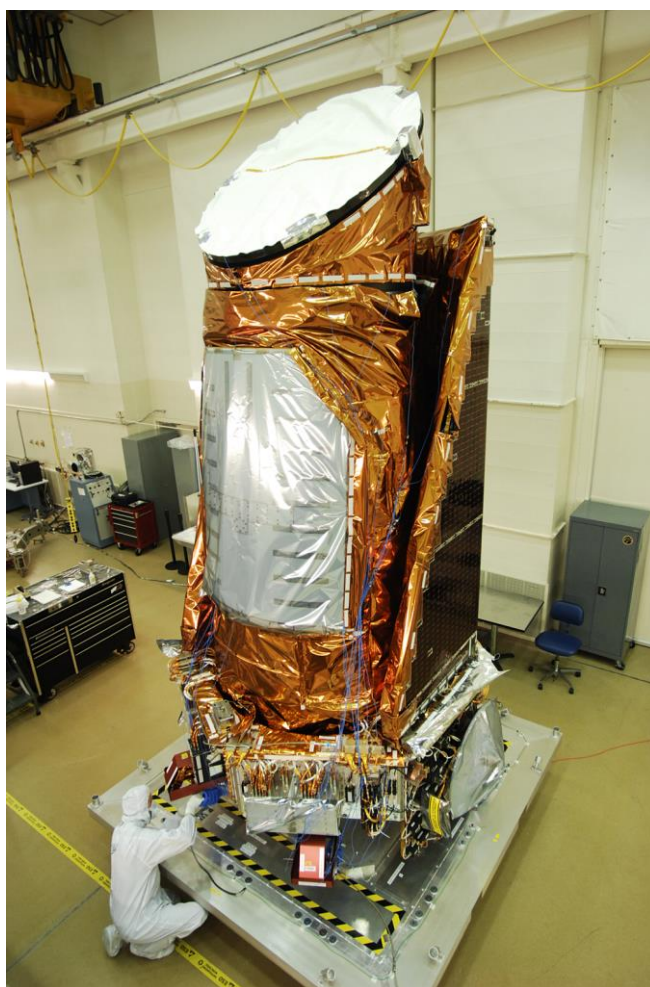
Bez prítomnosti silného centrálneho magnetického poľa vzniká takzvaný akréčný disk, ktorý je zdrojom zaujímavých radiačných procesov pozorovateľných na širokej škále elektromagnetického spektra. Je to štruktúra kde prebiehajú magnetohydrodynamické procesy v podmienkach nenapodobiteľných v pozemských laboratóriách. Tok hmoty diskom je nestabilný a silne turbulentný. Mnoho ďalších časovo premenlivých faktorov vplýva na fyzikálne vlastnosti a teda na vyžarovanie. Disk preto nesvieti konštantne, ale mení svoj žiarivý výkon na rôznych časových škálach.

Naším predmetom štúdia je akési mihotanie, ktoré sa chová na prvý pohľad čisto chaoticky.



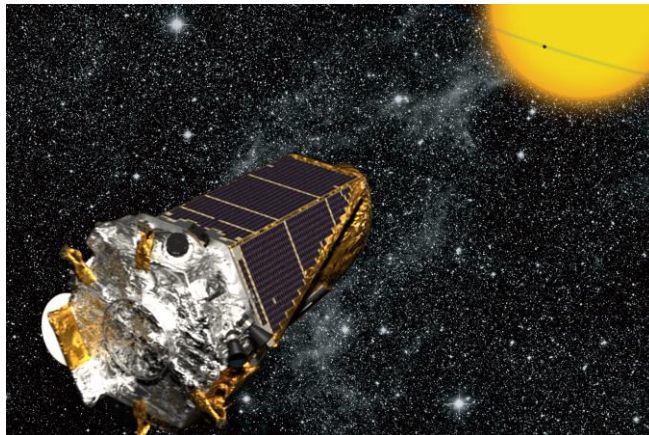
Žiarenie zosilňuje a zoslabuje úplne nepredvídateľne na časovej škále sekúnd až desiatok minút. V prípade exotických objektov s čiernymi dierami, môžu tieto zmeny jasnosti trvať aj kratšie ako sekundy. Jednou z možných príčin je práve spomínaný nestabilný a turbulentný tok hmoty, ktorého dôsledkom je nestabilná produkcia energie. Preto štatistické charakteristiky tohto mihotania môžu niesť mnoho informácií o hydrodynamických vlastnostiach plynu alebo plazmy v akréčných diskoch. Tento chaotický jav študujeme vo viditeľnej a röntgenovej oblasti spektra. Venujeme sa hlavne počítačovým simuláciám tohto javu a modelovaniu svetelných kriviek. Takto sa snažíme nájsť fyzikálny model, ktorý najlepšie napodobňuje reálne namerané dáta. Najlepší model by tak mal popisovať čo sa v diskoch deje. Samotné merané dáta zanalyzovali buď kolegovia vo svete alebo využívame verejné prípadne svoje vlastné družicové pozorovania.

Najlepšie dáta z viditeľného svetla, ktoré sme použili, boli z družice Kepler. Je to sonda Americkej agentúry NASA zhotovená za účelom neustáleho sledovania jednej oblasti oblohy, kde hľadá najmenšie zmeny jasnosti hviezd. Takto sa prejavujú planéty, ktoré prechádzajú pred svojou materskou hviezdou a čiastočne ju tak na chvíľu zakryjú.



Obr. Photo, Ball Aerospace [<http://kepler.nasa.gov/multimedia/photos/?ImageID=20>]

Čiže pôvodným účelom družice Kepler je hľadanie takzvaných exoplanét, teda planét okolo iných hviezd ako je Slnko. Lenže popri tomto hľadaní sonda sleduje množstvo iných objektov, ktoré sa nachádzajú v jej zornom poli. Takto môžeme analyzovať svetelné krivky s trvaním stovky dní s kadenciou približne jedna minúta čo sa nedá ani náznakom porovnať s pozemskými pozorovaniami.



Obr. Picture, NASA/Kepler mission/Wendy Stenzel.
[<http://kepler.nasa.gov/multimedia/artwork/artistsconcepts/?ImageID=145>]

Čím je padajúca hmota bližšie k centrálnej hviezde, tým vyžaruje vyššiu energiu. To najenergetickejšie žiarenie je v röntgenovej oblasti spektra. Takéto žiarenie sa nedá pozorovať zo zemského povrchu, preto sa používajú prístroje na obežnej dráhe Zeme.



Obr. Photo, ESA/XMM-Newton.
[http://xmm.esac.esa.int/external/xmm_science/gallery/public/conditions.shtml]

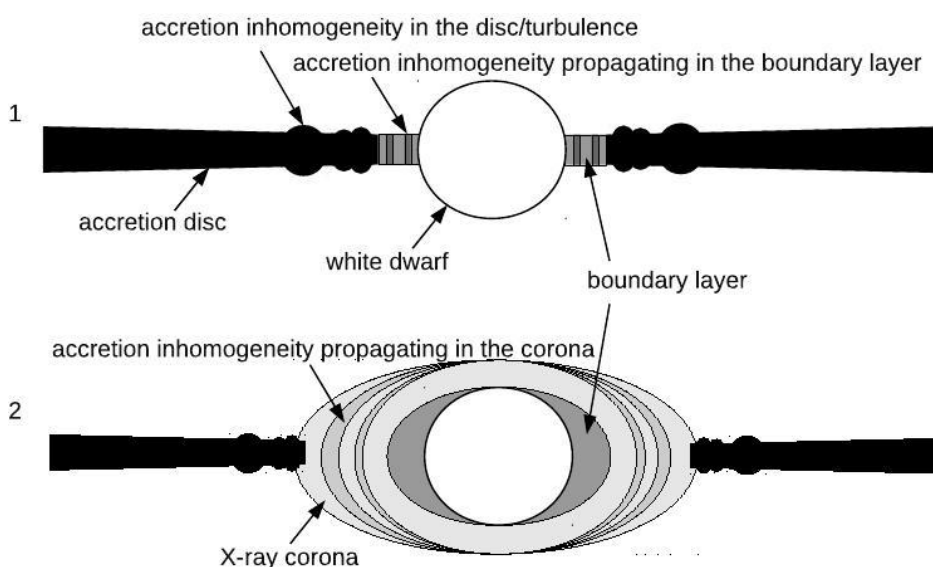
V našom prípade sme použili verejné dáta jednej dvojhviezdy a čakáme na náš vlastný pozorovací čas ďalšieho dvojhviezdného systému sondou XMM Newton, ktorá je z dielne Európskej vesmírnej agentúry ESA.



Obr. Photo, ESA/XMM-Newton.

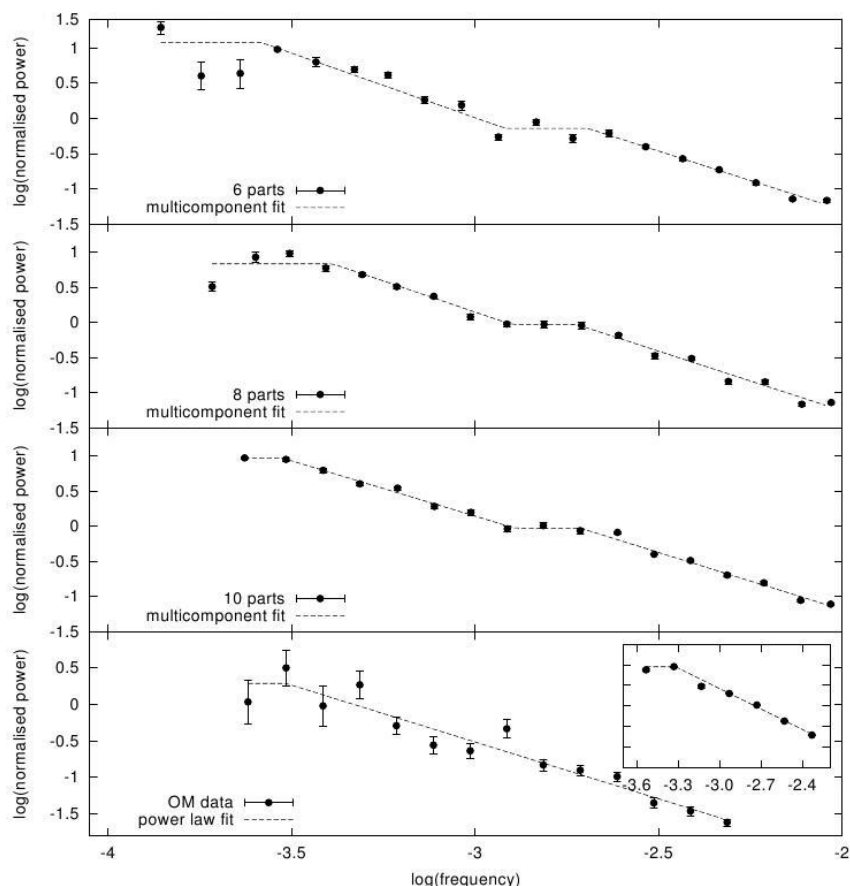
[http://xmm.esac.esa.int/external/xmm_science/gallery/public/conditions.shtml]

Takto sa snažíme dostať komplexný fyzikálny model padajúcej hmoty z jednej hviezdy na druhú a prispieť tak k rozšíreniu poznania fundamentálnych fyzikálnych procesov prítomných .

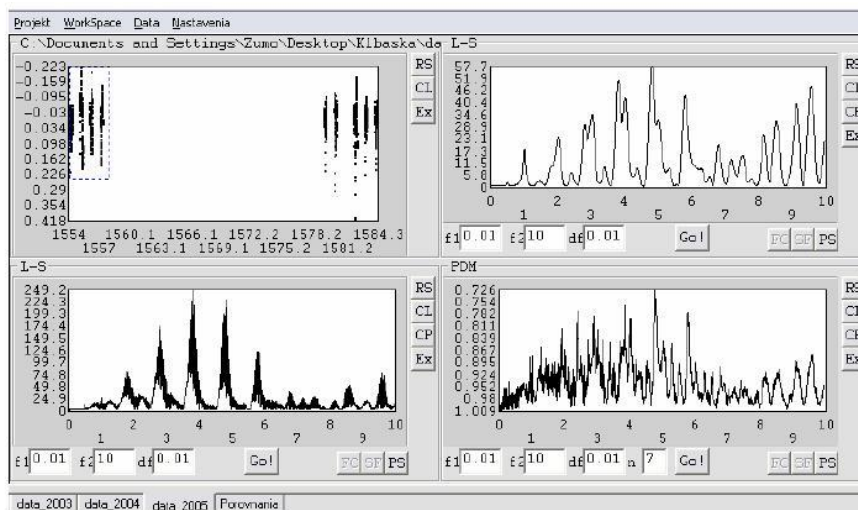


V prvom náhľade je náš výskum teoretický bez očividnej praktickej aplikácie. Rýchle oscilácie generované akréčnym procesom v študovaných dvojhviezdach majú charakter takzvaného červeného šumu. Teda furierovský obraz v logaritmickej škále je klesajúca lineárna funkcia s narastajúcou frekvenciou. Tu sa

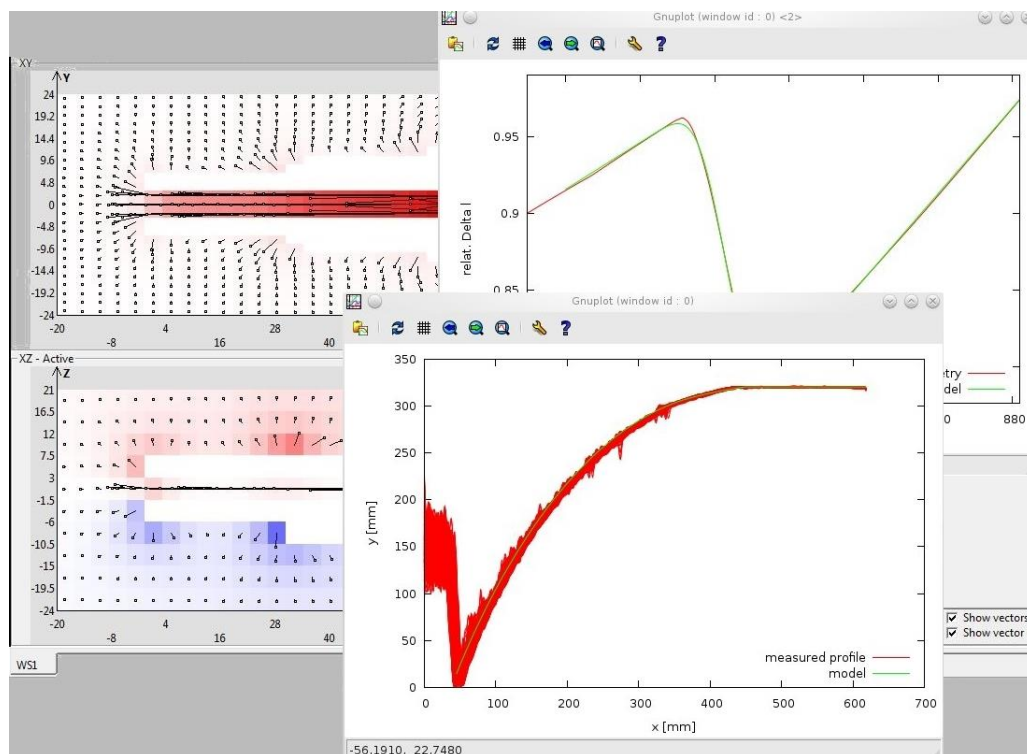
dostávame do problematiky, ktorá už nie je čisto astronomická. Červený šum je charakteristika stochastických procesov, ktoré sa študujú v mnohých ďalších disciplínach aj na našej Zemi prípadne v bezprostrednom okolí.



Ako konkrétny príklad aplikácie astronomického štúdia do iných odvetví môžeme spomenúť tvorbu softwaru na periódovú analýzu astronomických dát. Pôvodne bol zameraný na hľadanie koherentných periodicít v astronomických pozorovaniach, ale je pripravený na všeobecné použitie pre akýkoľvek druh záznamov, kde je cieľom študovať periodicitu alebo štruktúru záznamov. Cieľom nemusia byť iba časové rady, ale napríklad aj materiálové snímky z mikroskopu majú svoju textúru a štruktúru. Je nezmysel konkrétne vymenúvať možnosti aplikácie, pretože furierovská analýza je vedecká disciplína sama o sebe.



Pri skúmaní popísaných javov vyvíjame ďalšie vlastné analytické programy. Sú zamerané buď na monte carlo simulácie, alebo na optimalizácie parametrov. Sú to matematické metódy, ktoré majú opäť využitie mimo sféry astrofyziky. Takto sme sa venovali mnohým praktickým úlohám ako napríklad modelovaniu magnetických polí okolo cievok v bezpečnostných elektromechanických relé, meraniu polomerov oblých častí súčiastok do ložísk s využitím konfokálnej mikroskopie, modelovaniu časového priebehu dilatometrie nástrojových ocelí a pod... Náš astrofyzikálny výskum takto okrem svojho pôvodného zámeru prispieva matematickým a štatistickým aparátom k riešeniu praktických úloh. Aj keď sa pozeráme veľmi ďaleko mimo našu realitu, je to stále iba iný pohľad na reálny svet.



2.5 Vedecké centrum automatizácie, informačných a komunikačných technológií

Centrum sa zameriava na základný a aplikovaný výskum v oblastiach :

- automatizácia a inžinierstvo riadenia v priemysle
- umelá inteligencia, strojové učenie, interakcia človek - robot, robotika atď.
- IKT a medicína
- modelovanie, simulácia a optimalizácia výrobných systémov
- big data, business intelligence, data mining, získavanie znalostí
- matematické modely a reprezentácie (systémy s rýchlou spätnou väzbou)
- počítačové videnie a spracovanie obrazu
- mikroelektronika a vývoj hardvéru, mikročipy
- technológia senzorov, pneumatiké systémy a pohony, riadiace a kontrolné systémy, priemyselné komunikačné technológie
- vývoj softvéru (GIS , telemetrické systémy, Distribuované riadiace systémy), verifikácia a testovanie SW
- integrácia informačných a riadiacich systémov
- bioinžinierstvo, medicína / zdravie
- interdisciplinárne technické vedy

Centrum poskytuje podporu ostatným zložkám ústavu i fakulty v oblasti priemyselnej automatizácie, zberu a spracovania údajov, elektroniky, mikroelektroniky a ďalších príbuzných oblastiach.

Naše vybavenie umožňuje okrem iného vykonávať testy s využitím analógovo-digitálneho simulátora pripojiteľného na reálne zariadenia, priemyselného kamerového systému. Súčasťou činností centra je spolupráca na rôznych výskumných projektoch – domácich i zahraničných, ako aj pri príprave technologických návrhov podávaných projektov, kde sa vyžadujú znalosti najnovších technológií a trendov. Cieľom je tiež získavať vlastné výskumné projekty, u ktorých sa snažíme o financovanie z rôznych grantov.

K riešeným projektom patrí napríklad meranie zostatkového výkonu vyhoretého jadrového paliva, prípadne návrh technologických a systémových riešení v projekte MONES, ktorý je zameraný na telemetriu v okolí jadrových elektrární a tovární. Tu boli - okrem iného – navrhované komunikačné protokoly optimalizované pre zariadenia, komunikujúce prostredníctvom rádiomodemov.

Nezostávame však len v oblasti priemyslu, na projektoch spolupracujeme napríklad s odborníkmi z oblastí ako je zdravotníctvo, bezpečnosť, monitorovanie a podobne a ďalších technológií.

Naše znalosti vychádzajú ako z kontinuálneho sledovania súčasných trendov, tak i z praktických skúseností pri rôznych technologických riešeniach. Sem patria napríklad praktické riešenia ako je píla na rezanie polystyrénu, prípadne manipulátor pre automobilový priemysel s rozšírenými funkciami ako je napríklad bezpečný automatický návrat.

Veľkým trendom v súčasnosti je tzv. Big data a rôzne Cloud-systémy, ktoré umožňujú takéto obrovské množstvo dát reálne spracovávať a uchovávať. V tejto oblasti máme široké možnosti – od návrhu, cez realizáciu v reálnom alebo virtuálnom prostredí až po získavanie a distribúcia dát z rôznych senzorických systémov pre napĺňanie databáz.

Medical informatics

V oblasti uplatnenia matematiky, modelovania, automatizácie spracovania údajov, celkovo informatiky a súvisiacich technológií v medicíne, ako aj vývoja špeciálnych zariadení a health care systémov na monitoring zdravia nadviazalo centrum v roku 2014 pomerne silnú spoluprácu so SZU v Bratislave. Výsledkom boli výskumné úlohy v oblasti environmentálneho znečistenia, geoštatistiky a predikcie vývoja a sledovania látok u občanov SR, ako aj podanie návrhu medzinárodného projektu v rámci výziev H2020 v oblasti neuroplasticity.

Ďalšia oblasť výskumu je umelá inteligencia, strojové učenie, interakcia človek-stroj a robotika.

Robot na videu je schopný na základe hlasových povelov detegovať, rozpoznať a správne uchopiť predmet. Toto si vyžaduje implementáciu celého spektra metód strojového učenia a mechatronických systémov. Jedná sa o multidisciplinárnu oblasť, v ktorej sa stretáva množstvo oblastí ľudského výskumu. Či už to berieme z pohľadu konštrukcie kinematického mechanizmu v tomto prípade s 53 stupňami voľnosti, alebo z pohľadu oblasti riadiacich algoritmov na báze umelej inteligencie, ďalej množstvo rôznych dotykových senzorov, technológia rozpoznávania hlasu a spracovanie obrazu.

Pretavujú sa tu výsledky mnohých disciplín:

- Umelá inteligencia
- Počítačové videnie
- Spracovanie prirodzeného jazyka
- Robotika

- Interakcia človeka so strojom
- Matematika
- Psychológia
- Kognitívna veda
- Počítačová neuroveda
- Filozofia myslenia
- Rôzne inžinierske disciplíny
- Vývoj softvéru

Výskum v robotike a kognitívnych systémoch je dôležitý pre pokrok smerom ku strojom so schopnosťami ľudí. Mnoho inovácií je vedľajším produktom robotického výskumu. Čo si predstavíme pod pojmom **Kognitívne systémy**:

- Umelé kognitívne systémy sú schopné vnímať, porozumieť, učiť sa z individuálnej a sociálnej interakcie s okolitým prostredím
- Spoločenskými cieľmi sú potom vytváranie a vyvíjanie vedeckých základov umelých kognitívnych systémov a tiež sa pri tom inšpirovať štúdiom prirodzených kognitívnych systémov
- Očakáva sa, že výskum umelých kognitívnych systémov prinesie nové technológie otvárajúce cestu k rôznorodým aplikáciám zahŕňajúcim interakciu s reálnym svetom a jeho obyvateľmi

V budúcnosti bude treba riešiť rôzne ťažké úlohy, ako napr.:

- Schopnosť učiť sa zo skúsenosti – dovoľuje kognitívnym systémom prispôbovať sa vonkajším podmienkam a ich zmenám
- Robustnosť – schopnosti robotov by sa nemali príliš zhoršovať pri neočakávaných udalostiach a pozorovaniach
- Efektivita – cestou ku zlepšeniu výkonnosti je aj žiadúca schopnosť kognitívneho systému predvídať, a to ako v blízkej aj vo vzdialenejšej budúcnosti
- Prirodzené chovanie – tolerantné k mnohoznačnosti a neistote spôsobenej tiež spoluprácou napr. s ľuďmi, schopnosti robotov by sa tiež v čase mali zlepšovať

V súčasnosti je nielen globálny ale aj priamo z EU trend nasadzovania inteligentných robotov do oblasti priemyselnej automatizácie. To si bude vyžadovať nasadenie spomínaných kognitívnych systémov do oblasti, v ktorej doteraz išlo o pevné programovanie činnosti robota bez interakcie s človekom. Už všetci poprední výrobcovia priemyselných robotov pochopili nastupujúci trend a vyvíjajú roboty so senzormi a spätnou väzbou, umožňujúcimi bezpečnú interakciu s človekom. Nejedná sa teda o nahradenie ľudskej pracovnej sily robotom, ale o uľahčenie človeku pracujúcemu vo výrobní linke odbúrať rôzne neustále sa opakujúce a fyzicky namáhavé úkony práve za pomoci robotov s implementovanou umelou inteligenciou, ktoré budú schopné na základe hlasových pokynov vykonať určité činnosti, ktoré sa budú učiť od človeka. To si vyžaduje súhrn spomínaných senzorov, akčných členov, pohonov a kognitívneho systému robota. Príkladom robota, ktorý je nasadzovaný do oblasti priemyselnej automatizácie v Severnej Amerike, je robot Baxter. Tento robot je bezpečný a flexibilný, umožňuje úlohy ako nakladanie a obsluha strojov, balenie a manipulácia s materiálom. Nevyžaduje žiadne manuálne programovanie, namiesto toho je učiaci sa, čo redukuje čas a cenu za programátorov.

Na videu vidíte, že vykonáva opakujúcu sa úlohu, pričom človek mu dodá na určité miesta požadované súčiastky, pričom nemusí presne dodržať polohu umiestnenia, robot si sám zistí, kde sa súčiastky nachádzajú a jeho systém mu umožní ich správne uchopenie.

Keďže robotické uchopovanie je stále veľký problém, je mnoho vedeckých prístupov snažiacich sa o jeho zlepšenie. Jedným z nich je aj metóda tzv. hlbokých neurónových sietí, čiže neurónových sietí s viacerými

skrytými vrstvami. Umožňuje nám elegantne riešiť donedávna takmer neriešiteľné alebo časovo veľmi náročné problémy strojového učenia. Súvisí to so stále stúpajúcim výkonom grafických počítačových procesorov. Prečo grafických, keď sa jedná o robota? Architektúra moderných grafických procesorov je založená na veľkom množstve samostatných grafických jednotiek, až niekoľko tisíc v jednom procesore, ktoré v porovnaní s počítačovými čipmi poskytujú omnoho vyšší výkon a sú vynikajúco využiteľné práve v oblasti simulácie neurónových sietí, kde sa práve vyžaduje veľké množstvo simulovaných neurónov a jednotlivých vrstiev neurónových sietí. Celá technológia hlbokých neurónových sietí patrí pod tzv. **Deep Learning**. Pod tento prístup patria aj tzv. konvolučné neurónové siete.

Konvolučné neurónové siete

Rozpoznávanie sa rozkladá na viac úrovní. Každá úroveň reprezentuje istú mieru abstrakcie vstupného vzoru. Od úrovní, ktoré detegujú jednoduché lokálne príznaky, až po úrovne, ktoré v predkladaných vzoroch rozpoznávajú celé objekty. Tento princíp môžeme použiť i v klasických dopredných vrstevnatých sieťach. Sieť tohto typu budú mať mnoho skrytých vrstiev. To dovoľuje hierarchicky rozložiť problém na viac častí a tým urýchliť proces učenia. Jedna z metód pre učenie hlbokých sietí bola navrhnutá až v roku 2006. Pri učení bolo použité predučenie bez učiteľa, potom bola sieť doučená s učiteľom. Navrhnutú hlbokú sieť (tzv. Deep belief network) tvoria vrstvy z Obmedzených Boltzmanových strojov (Restricted Boltzmann machines, RBM). Neskôr navrhnutý variant hlbokéj siete sa skladá z vrstiev autoenkóderov. Obe tieto hlboké siete uspeli pri učení, práve kvôli predtrénovaniu bez učiteľa. Ďalšiu z mála výnimiek tvorili až donedávna práve konvolučné siete, ktoré majú veľa vrstiev a dajú sa efektívne a dobre naučiť pomocou algoritmu spätného šírenia.

Modelovanie a simulácia

Aplikovaný výskum v oblasti **simulácie a modelovania** realizujeme pomocou simulačných nástrojov Witness a Plant Simulation. Tieto nástroje slúžia na simuláciu, vizualizáciu, analýzu a optimalizáciu výrobných a logistických procesov.

Simulácia je výskumnou metódou, ktorej podstata spočíva v tom, že skúmaný dynamický systém nahradíme jeho simulátorom a s ním potom vykonávame pokusy s cieľom získať informáciu o pôvodnom skúmanom systéme. Prakticky ide o tzv. počítačovú simuláciu, pri ktorej je simulátor tvorený odladeným simulačným programom.

Simulácia ako podporný nástroj rozhodovania v riadení existujúcich či v projektovaní nových výrobných systémov sa využíva stále viac. Príkladom je najmä využitie v automobilovom priemysle, v dodávateľských reťazcoch pre automobilový priemysel, v logistike, leteckve, lodnom priemysle a v službách.

Hlavné úlohy a výhody simulácie sú:

- Podpora rozhodovania pri projektovaní systému a taktiež v prevádzke
- Analýza a optimalizácia
- Vizualizácia 2D alebo 3D
- Predpovedanie a "pohľad dopredu"
- Náhrada reálneho systému (možnosť tréningu, testovania bez nebezpečných situácií a bez nákladov na odstránenie následkov a pod.)

Realizácia simulačnej štúdie prebieha v štyroch fázach:

1. Analýza súčasného stavu
2. Vytvorenie simulačného modelu
3. Návrh experimentov

4. Odporúčania na základe výsledkov

Celý proces simulačného projektu zahŕňa analýzu systému, definovanie problému a formuláciu cieľov simulácie, zber a spracovanie informácií z procesu, odhady parametrov a typov rozdelení náhodných veličín; vytvorenie abstraktného logického modelu; zostavenie modelu na počítači; overovanie a testovanie modelu - verifikáciu a validáciu; plánovanie a prípravu simulačných experimentov; realizáciu simulačných experimentov (zmeny faktorov v modeli), prípadne úpravy modelu. Ďalej nasleduje vyhodnotenie a spracovanie výsledkov experimentovania, vypracovanie záverečnej správy a odporúčaní.

Princíp simulácie je jednoduchý. Namiesto toho, aby sme sledovali priebeh (dynamiku) reálneho procesu, sledujeme správanie sa simulačného modelu daného procesu. Tento prístup prináša rad výhod. Možno ním:

- skúmať správanie sa ešte neexistujúcich – navrhovaných systémov,
- porovnať správanie sa rôznych variantov systému – z hľadiska výberu výrobných zariadení,
- možnosti ich priestorového usporiadania ako aj algoritmov riadenia,
- posúdiť možnosti výroby rôznych sortimentov výrobkov,
- a v relatívne krátkom čase overiť správanie sa systému na dlhé obdobie.