



Veda,
výskum,
inovácie

Exploration of novel Cu-O and Pd-O phases by predictive computational modelling, physical vapor deposition and ion beam synthesis

Kód projektu: 09I03-03-V04-00334

Investícia	3 Excelentná veda
Kód a názov výzvy	09I03-03-V04 Štipendiá pre excelentných výskumníkov a výskumníčky R2-R4
Cieľ projektu	Tento multidisciplinárny a interdisciplinárny výskumný projekt kombinuje prediktívne modelovanie materiálov s magnetrónovým naprašovaním a syntézou pomocou iónovej implantácie s cieľom odhaliť nové fázy v binárnych Cu-O a Pd-O systémoch. Prediktívne modelovanie s využitím evolučných algoritmov a kvantovo mechanických výpočtov založených na DFT metódach bude použité na predpoveď kryštálových štruktúr a vlastností nových Cu-O a Pd-O fáz za účelom urýchlenia ich objavenia v experimente. Magnetronové naprašovanie a implantácia pomocou iónového zväzku budú použité na získanie experimentálnych poznatkov o tvorbe nových Cu-O a Pd-O fáz vo forme tenkých vrstiev. Výsledok projektu výrazne prehĺbi naše znalosti o kryštalickej a materiálnej chémii a vlastnostiach binárnych Cu-O a Pd-O systémov, čo poskytne nový priestor pre technologické využitie medi a paládia udržateľnejším a zdrojovo efektívnejším spôsobom.
Trvanie projektu	09/2024-08/2026
Schválená podpora projektu	164 636,10 €

Financované Európskou úniou z prostriedkov Plánu obnovy
a odolnosti SR



Financované
Európskou úniou
NextGenerationEU

PLÁN [OBNOVY]



ÚRAD PODPRESEDU VLÁDY
SLOVENSKEJ REPUBLIKY
PRE PLÁN OBNOVY
A ZNALOSTNÚ EKONOMIKU



VÝSKUMNÁ
AGENCIÁ