

Phase diagram of titanium from first principles calculations

Author: Radovan Bujdák

University: Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Materials Science and Technology

Supervisor: RNDr. Andrej Antušek, PhD.

Workplace of supervisor: Advanced technologies research institute

Year: 2018/2019

Abstract: The only way to create pressure - temperature phase diagrams of elements and their compounds in the past was the experimental approach, where the explored element or compound was exposed to different pressures and temperatures. The subject was then closely observed to determine how it behaves at such conditions. Some of those experiments proved ineffective due to the phase transitions occurring too slowly to be observable. Recent and more accurate approach to the creation of the phase diagrams is by using calculations from first principles. These calculations are usually done on large supercomputers and require a lot of time to run successfully and a lot of different software packages to do different calculations. The aim of our work is to create an automated script which utilizes first principle calculations. Our script, when executed, will use different software packages and calculate all necessary data to create a phase diagram for any chosen metallic element while the only input to the script will be the chosen element and what phases are we looking for. Due to its interesting physical properties and three stable phases, we have chosen titanium as our case study metallic element.

Modelovanie vstupu atómov chlóru do kryštálovej mriežky striebra

Modelling of chlorine enriched crystal lattice of silver

Author: Matej Uhliar

University: Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Materials Science and Technology

Supervisor: doc. Mgr. Marina Derzsi, PhD.

Workplace of supervisor: Advanced technologies research institute

Year: 2018/2019

Abstract: It is shown that phases of silver halides can have important optical, electric and magnetic properties and are intensively studied as promising candidates for high-temperature superconductors [1].

We are to study possibilities of incorporation chlorine (Cl) atoms into Face-centered cubic (FCC) crystal lattice of silver (Ag). The task is to analyse impact of chlorine atoms on deformation of FCC crystal lattice of silver based on data obtained by calculations from first principles. In this part of research, we studied the effects of incorporating up to 9 Cl atoms into octahedral voids of FCC crystal lattice containing 108 atoms of silver. Models of chlorine-enriched cubic silver lattice were created in Visualization for Electronic and Structural Analysis program (VESTA) [2] and quantum-mechanical optimization of the models was performed in program Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [3].

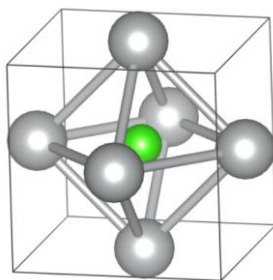


Fig.1 Cl atom in octahedral void

Referencies:

- [1] Silver route to cuprate analogs; Jakub Gawraczyński et al.; PNAS, 29.01.2019, vol. 116, no. 5
- [2] K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," *J. Appl. Crystallogr.*, 44, 1272-1276 (2011).
- [3] G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev.* **59** , 1758 (1999)

Polymérne kompozity z halloyzitu pre 3D tlač

Polymer composites based on halloysite for 3D printing

Vypracoval: Kristína Nádašská

Názov vysokej školy: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Vedúci práce: Mgr. Zdenko Špitálsky PhD.

Pracovisko: Bratislava: Úpol SAV

Rok vypracovania: 2019

Abstrakt: Cieľom práce bola príprava polymérneho kompozitu pre 3D tlač, ktorý by mal mať vhodné mechanické vlastnosti a bol by vhodný na tlačenie 3D tlačiarňou. Materiál sa pripravil pre tlačiareň (FDM) modelovanie metódou taveniny, kde struny sú vstupným materiálom. Vyrobito sa 5 kombinácií vzoriek v tvare struny s polymérnou matricou z recyklovaného polyethylentereftalát glykolu a ako plnivo sa použil minerál halloyzit s rôznou koncentráciou od 0,5 hm. % po 5 hm. %. Na vzorkách v tvare strún sa merali mechanické vlastnosti, rozmerové zmeny materiálu a hustota. Na lisovanej vzorke boli merané kontaktné uhly. Výsledky experimentu ukázali, že s rastúcou koncentráciou plniva v matrici klesá maximálne znesiteľné ťahové napätie aj predĺženie materiálu. Naopak meranie hustoty a test zmáčavosti polymérneho kompozitu s rastúcim obsahom plniva stúpa. Teplota mäknutia materiálu sa prídavkom plniva zvyšuje a koeficient lineárnej teplotnej rozťažnosti α klesá. Na základe stanovených cieľov a vyhodnocovaní viacerých vlastností skúmaného kompozitného materiálu je možné usúdiť, že kompozitný materiál je vhodný pre 3D tlač.

Kľúčové slová: 3D tlač, halloyzit, polymérna matrica, polyethylentereftalát glykol, kompozitný materiál

Kvantifikácia karbidických fáz v nástrojovej oceli spracovanej v kvapalnom héliu

Quantification of carbide phases in tool steel sub-zero treated in liquid helium

Vypracoval: Martin Blažek

Názov vysokej školy: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Vedúci práce: Ing. Jana Ptačinová, PhD

Pracovisko: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, Ústav materiálov

Rok vypracovania: 2019

Abstrakt: Cieľom práce bolo najmä získanie poznatkov o tepelnom spracovaní, predovšetkým zmrazovaní ledeburitických nástrojových ocelí a aplikovanie týchto poznatkov na hodnotenie štruktúrnych zmien v chróm – vanádovej nástrojovej ledeburitickej oceli. Nadobudnuté poznatky boli aplikované pri hodnotení štruktúrnych zmien chróm-vanádovej ledeburitickej ocele Vanadis 6 po tepelnom spracovaní s hlavným zameraním na zmeny v charakteristikách karbidických fáz. Experimentálna časť práce je venovaná mikroštruktúrnej analýze za pomoci riadkovacej elektrónovej mikroskopie a kvantifikácií, resp. stanoveniu počtu karbidických častíc v ledeburitickej nástrojovej oceli Vanadis 6 po kryogénnom spracovaní – zmrazovaní v kvapalnom héliu a popúšťaní pri rôznych zvolených teplotách. Ďalším predmetom experimentálnej časti je meranie tvrdosti ocele Vickersovou metódou a následné zostrojenie popúšťacej krivky z prislúchajúcich nameraných hodnôt tvrdosti. Dosiahnuté výsledky experimentov sú zohľadnené v záverečnom sumárnom vyhodnotení.

Kľúčové slová: chróm–vanádová ledeburitická oceľ, kryogénne spracovanie, martenzit, zvyškový austenit, karbidické fázy

Výroba kompozitu s polymérnou matricou a spevňujúcou zložkou vo forme kovových častíc

Vypracoval: Jozef Lesay

Názov vysokej školy: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Vedúci práce: Ing. Libor Ďuriška, PhD.

Pracovisko: UMAT MTF

Rok vypracovania: 2018/2019

Abstrakt: Primárnym cieľom tejto práce je vypracovanie metodiky prípravy kompozitu s polymérnou matricou a spevňujúcou zložkou vo forme kovových častíc technológiou vstrekovania. Sekundárne sa práca zaoberá aj snahou vyrobiť alternatívny materiál k už používaným polymérnym kompozitom s kovovými časticami a analýzou vlastností. Experiment pozostával z prípravy troch vzoriek, z toho jednej z čistého polyamidu 66 a dvoch kompozitných s rôznym podielom oceľových častíc Böhler S590 (1,7 a 5 hm. %) zastávajúcich post spevňujúcej zložky, pričom matricou bol polyamid 66. Vzorky boli pripravené technológiou vstrekovania na vstrekovacom lise určenom na vstrekovanie plastov. Tvar formy na vstrekovanie bol vybraný s cieľom podrobiť vstreknuté vzorky statickej skúške ťahom. Okrem ťahovej skúšky bola analýza vlastností vykonaná pomocou svetelnej mikroskopie, diferenčnej skenovacej kalorimetrie a dilatometrie. Zo statickej skúšky ťahom bolo zistené, že pri väčšom % prášku sa znižuje ťažnosť, ale pevnosť zostáva rovnaká. Vďaka svetelnému mikroskopu a stereomikroskopu bolo možné pozorovať mikroštruktúru daných vzoriek a tým si napomôcť k dosiahnutiu primárneho cieľa tejto práce.

Kľúčové slová: kompozitný materiál, vstrekovanie, polyamid 66, oceľový prášok, metodika prípravy

Vplyv boridovania na vlastnosti liatin

The influence of boronizing on the properties of cast iron

Vypracoval: Adam Ondrejčka

Názov vysokej školy: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Vedúci práce: doc. Ing. Mária Hudáková, PhD

Pracovisko: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, Ústav materiálov

Rok vypracovania: 2019

Abstrakt: Práca sa zaoberala pozorovaním rôznych vlastností boridovaných liatin. Na experiment boli vybrané dva druhy grafitických liatin, ktoré boli podrobené meraniu mikrotvrдости HV 0,1 a meraniu hrúbok boridických vrstiev. Taktiež bola uskutočnená analýza základného materiálu neboridovaných grafitických liatin. Proces boridovania bol uskutočnený, s využitím práškovej boridovacej zmesi, pri troch rôznych teplotách (850 °C, 950 °C, 1000 °C) a troch rôznych výdržiach na teplote boridovania (4 hod., 6 hod., 8 hod.).

Z výsledkov merania vyplynulo, že priemerné hodnoty hrúbok boridických vrstiev sa nachádzali v intervale od 35 do 194 µm, pričom vrstvy boli závislé od parametrov procesu boridovania a rástli s časom výdrže na teplote a aj s výškou teploty boridovania.

Najvyššia priemerná hodnota mikrotvrдости HV 0,1 bola nameraná pre sivú liatinu v oblasti FeB s hodnotou 2259 HV 0,1.

Z výsledkov bolo možné usúdiť, že sivá liatina dosiahla väčšie priemerné hodnoty mikrotvrдости aj hrúbok boridických vrstiev. Taktiež bolo možné konštatovať na základne porovnania výsledných vlastností boridovaných liatin, že je ich možné použiť na súčiastky alebo nástroje pracujúce v oblasti adhézneho aj abrazívneho opotrebenia.

Kľúčové slová: boridovanie, liatiny, grafit, mikroštruktúra, mikrotvrdosť

Analýza supravodivých pásov vhodných na modifikáciu vysokokapacitným povlakom

Analysis of superconducting tapes suitable for modification by high heat capacity coating

Vypracoval: Kristína Vyskočová

Názov vysokej školy: Slovenská technická univerzita v Bratislave,

Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Vedúci práce: Dr. Ing. Marcela Pekarčíková

Pracovisko: Slovenská technická univerzita v Bratislave, MTF so sídlom v Trnave, Ústav materiálov

Rok vypracovania: 2019

Abstrakt: Cieľom práce bolo modifikovať supravodivé pásy pridaním vysokokapacitnej a elektricky nevodivej vrstvy, ktorá bude absorbovať a odvádzať do okolia vznikajúce teplo v Ag vrstve počas rezistívneho stavu SCFCL, ktoré sa prehrieva a môže spôsobiť trvalú degradáciu supravodiča. Testovali sa vzorky HTS pásov s naneseným vysokokapacitným povlakom za účelom ich tepelnej stabilizácie počas stavov obmedzovania skratových prúdov. Vykonali sme elektrické merania pásov s povlakom a zistili sme, že čiastočne degradujú v kritickom prúde I_c po nanesení povlaku obsahujúci Stycast. Mali sme podozrenie na možnú reakciu Stycastu so supravodičom počas vytvrdzovania epoxidu, ak by bol supravodič nechránený na jeho povrchu. Následne bol prešetrovaný povrch supravodivých pásov na prítomnosť defektov v krycích vrstvách v ich východiskovom stave pomocou svetelnej a konfokálnej laserovej skenovacej mikroskopie. Zistili sme, že rozsah defektov jednej hrany pásky bol 5,7 % a druhej hrany pásky 1,4 %. Z toho vyplýva 4x väčšie poškodenie jednej hrany pásky pri prechode kladkovým systémom naparovacieho zariadenia. Z výsledkov môžeme usúdiť, že degradácia I_c mohla nastať v dôsledku reakcie Stycastu so supravodičom pri vytvrdzovaní epoxidu cez nečistosti v Ag vrstve. Teplotná rozťažnosť Stycastového kompozitu bola približne rovnaká ako u Aralditového, preto bola degradácia I_c v dôsledku príliš veľkej teplotnej rozťažnosti povlaku nepravdepodobná. Poruchovitosť striebra bola nanesením Cu vrstvy znížená (3,6 %), ale nie úplne odstránená.

Kľúčové slová: SCFCL, degradácia, povlak, supravodivá páska

Stanovenie príčiny poškodenia čapu na podvozkových častiach koľajových vozidiel

Microstructure analysis and mechanical tests of welded plates

Vypracované: Dávid Žitník

Názov školy: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Vedúci práce: doc. Ing. Roman Moravčík, PhD.

Rok vypracovania: 2019

Abstrakt: Práca sa zaoberá stanovením príčiny poškodzovania čapov určených pre podvozky koľajových vozidiel. Na analýzu boli poskytnuté tri čapy. Z toho jeden bol dodaný ako výkovok, ďalší bol označený ako nepoškodený čap a tretí čap, ktorý bol označený ako poškodený. Na stanovenie príčiny poškodenia čapov boli následne uskutočnené rôzne analýzy: makroskopická, mikroskopická a chemická. Z makroskopickej analýzy sa preukázalo, že vrub, ktorý sa nachádza na povrchu príruby čapu po kovaní nemá vplyv na celkové poškodenie čapu. Z chemickej analýzy sa preukázalo, že stanovené chemické zloženie ocele, ktorá bola použitá pri výrobe čapov, zodpovedá chemickému zloženiu ocele C45R. Pri mikroskopickej analýze boli viditeľné indukčne zakalené oblasti čapu. Čap bol poškodený na prírube, ktorá mala prekalený celý prierez. Na poškodenie má najvýraznejší vplyv nesprávny spôsob realizácie indukčného kalenia drieku čapu, ktorý nezodpovedá predpisu na výkrese. Pravdepodobnou príčinou poškodenia je nesprávny spôsob ich spracovania.

Analýza mikroštruktúry a mechanické skúšky zvarových spojov plechov

Microstructure analysis and mechanical tests of welded plates

Vypracoval: Martin Dobiš

Názov vysokej školy: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Vedúci práce: doc. Ing. Marián Hazlinger, CSc.

Pracovisko: Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, Ústav materiálov

Rok vypracovania: 2019

Abstrakt: Cieľom tejto práce bola analýza zvarových spojov plechov a vyhodnotenie ich kvality. V spolupráci s ÚVTE boli laserom vyhotovené zvarové spoje. Zvárané boli obojstranne pozinkované tenké plechy určené pre konštrukciu karosérií osobných automobilov. Plech s hrúbkou 1,4 mm bol z materiálu LAC 240Y320T, norma MBN 11250-2011-05. Pre vyhodnotenie kvality zvarových spojov bola realizovaná metalografická analýza a mechanické skúšky. Mikroštruktúrnou analýzou sa zistila mierne hrubozrnnejšia štruktúra v tepelne ovplyvnenej oblasti v porovnaní s východiskovým stavom. Veľkosť zrna v tepelne ovplyvnenej oblasti zodpovedala č. 8.0 a veľkosť zrna základného materiálu zodpovedala č. 8.5 podľa normy DIN EN ISO 643. Pre zistenie pevnosti zvarového spoja bola realizovaná skúška ťahom. Skúšobné tyče sa po skúške ťahom neporušili v mieste zvarového spoja. Zvarový spoj kvalitou vyhovoval. Zrealizovaná bola aj skúška hlbokoťažnosti podľa Erichsena ktorá bola uskutočnená na východiskovom materiály a zvarovom spoji pre zistenie Erichsenovho indexu. Pre vyhodnotenie kvality zvarového spoja bol realizovaný aj priebeh tvrdosti v priereze na metalograficky pripravenej vzorke, postupne zvarový kov, tepelne ovplyvnená oblasť a základný materiál. Z mikroštruktúrnej analýzy a mechanických skúšok sa preukázalo, že laserom vyhotovené zvarové spoje kvalitou vyhovujú.

MIKROŠTRUKTÚRA, FÁZOVÉ ZLOŽENIE A KORÓZNA ODOLNOSŤ BINÁRNYCH ZLIATIN Al-Co V ZÁSADITOM PROSTREDÍ

Vypracoval: Bc. Romana Tomšová

Názov vysokej školy: MTF STU

Vedúci práce: Mgr. Marián Palcut, PhD.

Pracovisko: Ústav materiálov

Rok vypracovania: 2018/2019

Abstrakt: Cieľom tejto práce bolo preštudovať mikroštruktúru, fázové zloženie a koróznou odolnosť binárnych zliatin Al-Co v zásaditom prostredí. Oblúkovým tavením v ochrannnej argónovej atmosfére boli pripravené tri hliníkové zliatiny s podielom kobaltu 1, 3 a 4 at. %. Fázové zloženie jednotlivých zliatin bolo preskúmané röntgenovou difrakčnou analýzou. Mikroštruktúra a chemické zloženie zliatin boli následne sledované riadkovacou elektrónovou mikroskopiou a energiovo-disperznou röntgenovou spektroskopiou. Každá zo zliatin pozostávala z dvoch fáz: Al_9Co_2 a tuhého roztoku hliníka (Al). Fáza Al_9Co_2 bola primárne precipitovaná fáza, ktorá mala dendritickú mikroštruktúru. Jej objemový podiel v zliatinách sa zvyšoval s rastúcim obsahom Co. Korózna odolnosť zliatin v stave po odliatí bola preštudovaná potenciodynamickou koróznou skúškou v zásaditom vodnom roztoku NaOH s koncentráciou $0,01 \text{ mol.dm}^{-3}$ (pH=12). Tafelovou extrapoláciou nameraných polarizačných kriviek boli získané korózne rýchlosti a korózne potenciály. Bolo zistené, že korózna rýchlosť zliatin vzrastala s rastúcim podielom kobaltu. Korózii najviac podliehala zliatina s 4%-ným podielom Co. Štúdiom mikroštruktúry a chemického zloženia zliatin po korózii sa zistilo, že v priebehu korózie dochádzalo k prednostnému rozpúšťaniu (Al). Dendrity fázy Al_9Co_2 boli menej poškodené koróznym napadnutím. Navyše, na povrchu dendritov sa vytvárala pasívna vrstva bohatá na kyslík, ktorá chránila fázu Al_9Co_2 pred koróziou.

Kľúčové slová: mikroštruktúra, chemické zloženie, korózia, Al, Co