

ŠTÚDIUM BOKOMPATIBILNÝCH ZLIATIN NA BÁZE Ti a Fe

Vypracoval: Jakub Rafajdus

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

Vedúci práce: Ing. Libor Ďuriška, PhD.

Pracovisko: Ústav materiálov

Rok vypracovania: 2020/2021

Abstrakt: Biokompatibilné kovové zliatiny vďaka svojim vynikajúcim mechanickým, koróziivzdorným a biokompatibilným vlastnostiam nachádzajú svoje špecifické uplatnenie v rôznych oblastiach medicíny, a preto sú vhodné na použitie v ľudskom organizme. Táto práca sa preto zamerala vo svojich cieľoch na štúdium a mikroštruktúrnú analýzu dvoch rôznych kovových biokompatibilných zliatin používaných v medicíne. Prvou skúmanou zliatinou je zliatina Ti-6Al-4V, používaná ako jeden z najdôležitejších biomateriálov pre endoprotézy bedrových kĺbov. Rozboru bola podrobená aj oceľ neznámeho chemického zloženia vo forme skrutiek na fixáciu a fragmentáciu fraktúr kostí. Mikroštruktúrna analýza bola realizovaná pomocou riadkovej elektrónovej mikroskopie, ktorej súčasťou bola aj chemická analýza zloženia jednotlivých fáz, vykonaná bodovou metódou energiovo-disperznej röntgenovej spektroskopie. Na zliatine Ti-6Al-4V bolo tiež uskutočnené posúdenie koróznej odolnosti prostredníctvom korózneho merania za použitia potenciodynamické polarizácie vo fyziologickom roztoku a následne bola stanovená korózná rýchlosť. Mikroštruktúra titánovej zliatiny bola analyzovaná aj po korózných meraniach.

Po vykonaných laboratórnych experimentoch a s nimi súvisiacich výpočtoch sa prišlo k záveru, že titánová zliatina Ti-6Al-4V mala koróznú rýchlosť $v_{kor} = 1,40 \mu\text{m}\cdot\text{rok}^{-1}$ a celý povrch vzorky po korózii zostal nezmenený. Na základe zistenia chemického zloženia ocele skrutky bol typ ocele odhadnutý na 317,317L.

Kľúčové slová: biokompatibilita, Ti-6Al-4V, korózia, potenciodynamická polarizácia, koróziivzdorná oceľ

DSC analýza zliatin cínu

Vypracoval: Márton Adrián

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

Vedúci práce: Ing. Marián Drienovský, PhD.

Pracovisko: Ústav materiálov

Rok vypracovania: 2020/2021

Abstrakt:

Termická analýza je vedný odbor, ktorý sa zaoberá vplyvom tepla na materiál. Diferenčná skenovacia kalorimetria (DSC) je jednou z najrozšírenejších metód termickej analýzy. Zliatinycínu a spájky typu Sn-Ag-Cu (SAC) patria k najčastejšie používaným mäkkým bezolovnatým spájkam v praxi. DSC umožňuje presne stanoviť ich teplotný rozsah tavenia. Táto práca sa zaoberá popisom tuhnutia dvoch podeutektických systémov SAC108 a SAC305..

Kľúčové slová: Diferenčná skenovacia kalorimetria (DSC)

EXPLORING CRYSTAL CHEMISTRY OF BINARY SILVER CHLORIDES WITH EVOLUTIONARY ALGORITHMS AND DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Vypracoval: Matej Uhliar

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

Pracovisko: Ústav výskumu progresívnych technológií

Vedúci práce: doc. Mgr. Mariana Derzsi, PhD.

Rok vypracovania: ak. rok 2020/2021

Abstrakt:

Silver chloride, AgCl, is well known crystalline solid with good photoactive properties. It is but only one known compound in Ag-Cl system, while Cu and Au form aside from mono- and dihalides also M_4Cl_8 and M_2Cl_6 phases with chlorine. Additionally, Ag forms variety of phases with fluorine and binary transition metal-chlorides are rich for different phases, mostly di- and trichlorides. Thus, we have started to investigate the Ag-Cl system for new possible phases. Through employment of evolutionary algorithms (EA) in combination with Density Functional Theory (DFT), the crystalline $AgCl_2$ phase has been predicted and also computing simple DFT models of Cl-stuffed/enriched cubic silver and *vice versa*, has uncovered possible existence of other stoichiometries in Ag-Cl system. In this contribution, we present crystal and electronic structures and formation enthalpies that we acquired using combination of EA and DFT. Additionally, we have considered also existence of new phases by substitution of fluorine for chlorine in Ag_xF_y phases and the possibility of their stabilization under external pressure. Our computational study reveals very different crystal chemistry in silver chlorides from silver fluorides involving formation of polychloride anions.

Kľúčové slová: počítačové modelovanie, chloridy striebra, polychloridy

SYNTHESIS OF CARBON PARTICLES BY ELECTROLYSIS FROM MOLTEN CARBONATES

Author: Tereza Machajdíkóvá

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

Supervisor: doc. Ing. Martin Kusý, PhD.

Workplace of supervisor: Institute of Materials Science

Year: 2020/2021

Abstract:

Carbon materials have excellent mechanical and electrical properties. They are great candidates for various applications, including biomedicine, electronics, and composite fillers. However, there are several drawbacks to using carbon materials. The high cost of synthesis and the difficult preparation are two of the most significant issues.

The work aims to reproduce the experimental setup as described in several scientific papers. The goal is to determine and adjust the process parameters in a way that the experiment will yield carbon particles. The electrolysis of lithium carbonate was contained in an alumina crucible. Nickel wire served as anode and zinc electro-plated steel wire served as the cathode. The electrolysis was performed using an initial low current followed by a high constant current at 780°C. It has been shown that under those conditions carbon dioxide is converted into carbon particles in a lithium carbonate electrolytic bath. A eutectic combination of carbonates, including lithium carbonate (Li_2CO_3), sodium carbonate (Na_2CO_3), and potassium carbonate (K_2CO_3), can be used as the electrolyte as well. One and a half hours of electrolysis can produce 119.5 mg of carbon particles.

The process uses carbon dioxide as the primary reactant to produce valuable carbon particles at a lower cost.

Key words: electrolysis, carbon particles, molten carbonates, composites, climate change

SYNTÉZA PD-OX POMOCOU RÁDIOFREKVENČNÉHO NAPRAŠOVANIA A IÓNOVEJ IMPLANTÁCIE

Vypracoval: Filip Ferenčík

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

Vedúci práce: Ing. Pavol Noga, PhD.

Pracovisko: Ústav výskumu progresívnych technológií (MTF)

Rok vypracovania: 2020/2021

Abstrakt:

Cieľom práce je navrhnúť spôsob syntézy PdOx vo forme tenkých vrstiev s čo najvyšším oxidačným číslom, ideálne PdO₂ a postup experimentálne overiť. Motiváciou získania vyššieho oxidačného čísla je jeho pravdepodobná vyššia katalytická aktivita spôsobená oxidom, čo by mohlo viesť k lepšiemu porozumeniu danej problematiky s následnou aplikáciou v technickej praxi napríklad v automobilových katalyzátoroch. PdO₂ bolo syntetizované len raz bez potvrdenia inými štúdiami. Okrem toho sa stabilne vyskytovalo len vo forme tenkých vrstiev a stabilizované bolo iným oxidom, a teda nikdy sa nevyskytovalo samostatne. Experimentálny postup začína návrhom a optimalizáciou procesu výroby tenkých vrstiev PdO pomocou rádiografrekného naprašovania z paládiového drôtu. Na prekonanie bariéry vzájomného zmiešania Pd a O je použitá technológia plazmou podporovaná iónová implantácia k dosiahnutiu pomeru Pd a O 1:2 v objeme vrstvy. RTG difrakcia a RBS potvrdilo schopnosť naprašovať a stabilne vyrábať PdO, RBS potvrdilo zloženie implantovaných vrstiev Pd-28at%, O-67at%. Následnými krokmi bude štruktúrna analýza vytvorených nanokryštálov a odladenie procesu pre výrobu hrubších vrstiev s následnou implantáciou pomocou urýchľovača.

Kľúčové slová: Katalýza, oxidy paládia, syntéza, rádiografrekné naprašovanie, iónová implantácia

NÁVRH ATOMISTICKÝCH MODELOV MÁLO ZNÁMEHO OXIDU PALÁDIA PdO₂

Vypracoval: Bc. Diana Fabušová

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

Vedúci práce: doc. Mariana Derzsi, PhD.

Pracovisko: Ústav výskumu progresívnych technológií, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave

Rok vypracovania: 2020/2021

Abstrakt:

Paládium je dôležitým katalyzátorom v mnohých katalytických reakciách s rôznymi technologickými aplikáciami. Okrem čistého kovu sa katalytická aktivita čoraz viac pripisuje oxidom paládia, ktoré sú však slabo charakterizované. Jediným dôkladne vedecky študovaným a technologicky využívaným oxidom paládia je PdO. V našej súčasnej štúdii sa zameriavame na teoretické skúmanie PdO₂. Jeho tvorba bola pozorovaná pri zvýšenom hydrostatickom tlaku a bola navrhnutá štruktúra rutilu. Použitím DFT modelovania sme získali podrobnejšie informácie o existencii PdO₂ a to možné polymorfy, podrobnosti o kryštálových štruktúrach, vibračné vlastnosti a termodynamickú stabilitu. Chceme ukázať, že okrem rutilovej štruktúry môže PdO₂ vytvárať rôzne polymorfy s oveľa priaznivejšou zlučovacou entalpiou. Skúmanie týchto polymorfov, vo vzťahu k PdO, a výpočtami ich infračervených spektier v širšom rozsahu tlaku nám môže pomôcť pri ich identifikácii v budúcich experimentoch.

Kľúčové slová: PdO₂, DFT modelovanie, zlučovacia entalpia, termodynamická stabilita, kryštálová štruktúra

ŠTÚDIUM POŠKODENIA VO VYSOKOTEPLŔNÝCH SUPRAVODIVÝCH PÁSKACH SPÔSOBENÉHO OBMEDZOVANÍM SKRATOVÝCH PRÚDOV

Vypracoval: Bc. Kristína Vyskočová

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

Vedúci práce: Dr. - Ing. Marcela Pekarčíková

Rok vypracovania: 2020/2021

Abstrakt

Cieľom práce bolo analyzovať a porovnať poškodenie vo vzorkách pôvodných a modifikovaných vysokoteplotných supravodivých (HTS) pásov, ktoré bolo spôsobené v počas experimentov simulovania skratového prúdu pri rôznych podmienkach. HTS pásy boli modifikované pridaním vysokokapacitnej a elektricky nevodivej vrstvy (Stycast + SiC), ktorej funkciouje absorbovať a odvádzať do okolia teplovznikajúce v Ag vrstve. Táto vrstva sa inakšie počas rezistívneho stavu obmedzovača skratových prúdov prehrieva a môže spôsobiť trvalú degradáciu celého zariadenia. Elektrické merania preukázali, že kritický prúd (I_c) HTS pásov vo východiskovom stave výrazne degraduje pri pôsobení intenzity elektrického poľa $E > 65$ V/m, alebo nanesení vysokokapacitnej vrstvy sú pásy spôsobilé zniesť až $E = 130$ V/m bez výraznej degradácie I_c . Ich postupná degradácia bola dosiahnutá až zvýšením E na hodnoty > 150 V/m. Pokles I_c vo vzorkách bez povlaku bola spôsobený vznikom rozsiahlych trhlín v supravodivej vrstve šíriacich sa pozdĺž šírky pásky, ktoré sú prekážkou pre tok supravodivého prúdu. Tento typ poškodenia sa nevyskytoval vo vzorkách s robustnejšou tepelnou stabilizáciou vo forme kompozitného povlaku, v ktorých bolo nájdené poškodenie supravodivej vrstvy vyslovene lokálneho charakteru vo forme malých, horizontálne orientovaných trhlín a malých oblastí s mikroštruktúrnou zmenou v supravodivej vrstve.