

Rada instituce

Zápis ze 114. jednání Rady ÚFM AV ČR, v. v. i.

Datum konání: 19. 12. 2022

Přítomni: A. Dlouhý, M. Friák, R. Gröger, P. Hutař, M. Kotoul, T. Kruml, D. Munzar, L. Náhlík, L. Pantělejev, R. Vrba, J. Spousta (11 členů)

Omluveni: S. Seitzl, Z. Chlup

Hosté: S. Fintová, M. Jambor, A. Kroupa, H. Maděrová, I. Šulák

Jednání Rady zahájil předseda, přivítal přítomné členy a hosty. Konstatoval, že Rada je usnášeníschopná. Představil program jednání.

Program:

1. Ověření a schválení zápisu ze 113. zasedání Rady instituce.
2. Projednání a schválení Vnitřního mzdového předpisu ÚFM.
3. Projednání Plánu výzkumné činnosti ÚFM na období 2023-2027.
4. Projednání a schválení tří nejlepších výsledků ÚFM pro Výroční zprávu AV ČR.
5. Projednání připravovaných projektů do výzvy OP JAK Špičkový výzkum.
6. Různé.

Ad 1) Ověření a schválení zápisu ze 113. zasedání Rady

Přítomní členové Rady nevznesli žádné náměty ani připomínky ke znění tohoto zápisu.

Zápis ze 113. zasedání Rady byl ověřen a schválen.

Ad 2) Projednání a schválení Vnitřního mzdového předpisu ÚFM.

Předseda Rady předal slovo řediteli T. Krumlovi. Ten představil změny ve Vnitřním mzdovém předpisu ÚFM, který měli všichni členové předem k dispozici. S ohledem na dobré hospodaření ÚFM a výhledu financování na další rok navrhl ředitel navýšení mzdových tarifů ve všech třídách. Po krátké diskuzi nechal předseda hlasovat o schválení vnitřního mzdového předpisu ÚFM v předloženém znění.

Výsledek hlasování:

PRO: 11

PROTI: 0

ZDRŽEL SE: 0

Rada projednala a schválila Vnitřní mzdový předpis ÚFM v předloženém znění.

Ad 3) Projednání Plánu výzkumné činnosti ÚFM na období 2023-2027.

T. Kruml se ujal slova a ve stručnosti představil dokument „Plán výzkumné činnosti ÚFM na období 2023-2027“, který měli členové předem k dispozici, a otevřel diskuzi.

Rada s připomínkami projednala Plán výzkumné činnosti ÚFM na období 2023-2027. Upravený plán výzkumné činnosti ÚFM na období 2023-2027 tvoří přílohu tohoto zápisu.

Ad 4) Projednání a schválení tří nejlepších výsledků ÚFM pro Výroční zprávu AV ČR.

Předseda Rady přítomným sdělil, že ze čtyř výzkumných témat diskutovaných na minulém zasedání Rady je třeba vybrat tři nejlepší. Zpracovaná témata - ODS materiály (F. Šiška), 3D tisk a Additive manufacturing (L. Kunčická), Nanostrukturní materiály (L. Bertolla) a Uchovávání vodíku (J. Čermák) - měli členové Rady předem k dispozici.

Následně předseda otevřel diskuzi k výběru výsledků.

Z názorů členů Rady v diskuzi předseda navrhl hlasovat o schválení výběru tří nejlepších výsledků, a to: Uchovávání vodíku (J. Čermák), Nanostrukturní materiály (L. Bertolla) a ODS materiály (F. Šiška).

Před samotným hlasováním A. Dlouhý navrhl hlasovat o protinávrhu, a to o výběru tří nejlepších výsledků: ODS materiály (F. Šiška), Uchovávání vodíku (J. Čermák) a Additive manufacturing (L. Kunčická).

Výsledek hlasování protinávrhu A. Dlouhého:

PRO: 3

PROTI: 6

ZDRŽEL SE: 2

Rada neschválila protinávrh A. Dlouhého na výběr tří nejlepších výsledků ÚFM, a to: ODS materiály (F. Šiška), Uchovávání vodíku (J. Čermák) a Additive manufacturing (L. Kunčická) pro výroční zprávu AV ČR.

Následně předseda nechal hlasovat o shora uvedeném návrhu tří nejlepších výsledků, a to: Uchovávání vodíku (J. Čermák), Nanostrukturní materiály (L. Bertolla) a ODS materiály (F. Šiška).

Výsledek hlasování:

PRO: 11

PROTI: 0

ZDRŽEL SE: 0

Rada schválila tři nejlepší výsledky ÚFM, a to: Uchovávání vodíku (J. Čermák), Nanostrukturní materiály (L. Bertolla) a ODS materiály (F. Šiška) pro výroční zprávu AV ČR.

Rada nicméně doporučuje zpracovat všechny čtyři předložené výsledky do výroční zprávy ÚFM za rok 2022.

Ad 5) Projednání připravovaných projektů do výzvy OP JAK Špičkový výzkum.

Předseda Rady předal slovo L. Náhlíkovi, který přítomným představil připravované projekty ÚFM do výzvy OP JAK Špičkový výzkum.

L. Náhlík v úvodu členy Rady informoval o zapojení ÚFM do 5 projektů výzvy č. 02_022_008 Špičkový výzkum Operačního programu Jan Amos Komenský, a to čtyřikrát v roli partnera a jednou v roli žadatele. Představil členům zaměření projektů, plánované období realizace projektů, konsorcia jednotlivých projektových záměrů, zodpovědné osoby ÚFM, plánované rozpočty projektů, plánované investice a investiční náklady v projektech, informoval o výši režijních nákladů a o výši spolufinancování projektů.

Následovala diskuze členů Rady.

Rada projednala a doporučuje podání a zapojení ÚFM do níže uvedených projektů v rámci výzvy OP JAK Špičkový výzkum:

- 1) Pokročilé materiály a nanotechnologie pro produkci, transport a skladování vodíku (H-tech4Society), žadatel ÚFM, navrhovatel L. Náhlík.
- 2) Senzory a detektory pro budoucí informační společnost (SenDiSo), žadatel Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., spolunavrhovatel R. Gröger.
- 3) Strojní inženýrství biologických a bioinspirovaných systémů (MeBioSys), žadatel Vysoké učení technické v Brně (FSI), spolunavrhovatel P. Hutař
- 4) Kovové materiály pro konkurenceschopnou a udržitelnou budoucnost evropského průmyslu (METALS4ALL), žadatel COMTES FHT a.s., spolunavrhovatel L. Náhlík
- 5) Materiály a technologie pro udržitelný rozvoj (MATUR), žadatel Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, spolunavrhovatel S. Seitl

Ad 6) Různé

Předseda předal slovo L. Náhlíkovi, který v zastoupení S. Seitla přítomným představil záměr projektu s názvem „Inovativní systémy pro výrobu stínící techniky“ do výzvy programu Aplikace, OP TAK. Žadatelem je firma BEMATECH s. r. o., ÚFM je partnerem projektu, spolunavrhovatelem je S. Seitl.

Rada projednala a doporučuje podání návrhu projektu s názvem „Inovativní systémy pro výrobu stínící techniky“ do výzvy programu Aplikace, OP TAK, spolunavrhovatel S. Seitl.

L. Náhlík přítomné informoval o úspěchu doktoranda ÚFM J. Pongrácze, jehož snímek byl vybrán mezi fotografie do nástěnného kalendáře AV ČR pro rok 2023.

Termín příštího jednání Rady nebyl stanoven

Seznam příloh:

Příloha č. 1 – Plán výzkumné činnosti ÚFM na období 2023-2027.

V Brně dne 21. 12. 2022

Zapsal: Michal Zouhar



Schválil: Roman Gröger, předseda Rady



Plán výzkumné činnosti Ústavu fyziky materiálů AV ČR, v. v. i. na období 2023-2027

Úvod

Plán výzkumné činnosti ÚFM AV ČR, v. v. i. pro roky 2023-2027 plynule navazuje na Plán výzkumné činnosti definovaný pro léta 2018-2022 a je formulován ve dvou horizontech. V krátkodobém, dvouletém horizontu, je činnost ÚFM do značné míry určena běžícími projekty. V delším horizontu 5 let je pak zohledněn směr rozvoje činnosti ústavu. Aktuální výzkumná témata vycházejí z potřeb společnosti, přičemž reflektují jak strategii ČR v oblasti VaVaI, tak závěry a doporučení Hodnocení výzkumné a odborné činnosti pracovišť AV ČR¹ a Metodiky M17+².

Předmětem hlavní činnosti ÚFM v nadcházejícím pětiletém období bude výzkum v oblasti fyziky materiálů a dalších materiálových věd se zaměřením na kovové i nekovové materiály, zejména výzkum fyzikálních vlastností pokročilých materiálů ve vztahu k jejich mikrostruktuře a způsobu přípravy. ÚFM se zaměřuje zejména na základní, orientovaný a aplikovaný výzkum sloužící k rozvoji znalostní společnosti, podpoře ekonomického růstu a udržitelného rozvoje energetiky s ohledem na ochranu životního prostředí, přičemž reaguje na dynamicky se měnící společenské požadavky. **Svou činností bude přispívat zejména ke zvyšování úrovně poznání a vzdělanosti a k využití výsledků vědeckého výzkumu v praxi.** Budou získávány, zpracovávány a rozšiřovány vědecké informace, publikovány vědecké práce v renomovaných vědeckých časopisech, vypracovávány vědecké posudky, stanoviska a doporučení.

Očekává se úspěšné pokračování partnerské účasti ÚFM ve Středoevropském technologickém institutu CEITEC, která výrazně rozšiřuje zejména experimentální možnosti pracoviště a možnosti získávat výzkumné projekty. Pozornost bude věnována také výuce a vědecké výchově studentů. Ve spolupráci s vysokými školami budou uskutečňovány doktorské studijní programy a vychovávání vědeckých pracovníků. K tomuto budeme využívat společné akreditační doktorského studia s Vysokým učením technickým v Brně, Masarykovou univerzitou a výzkumným centrem CEITEC. Mimořádně důležitou aktivitou pro zvyšování excelence pracoviště je rozvoj mezinárodní spolupráce, včetně snahy o získání projektů se zahraničními partnery, přijímání a vysílání stážistů, výměny vědeckých poznatků a přípravy společných publikací.

Budou pořádána vědecká setkání a podporovány organizace kvalitních mezinárodních konferencí a seminářů (např. v roce 2024 bude ÚFM pořádat významnou mezinárodní konferenci Multiscale

¹ Hodnocení výzkumné a odborné činnosti pracovišť AV ČR za období 2015–2019, viz <https://www.avcr.cz/cs/onas/hodnoceni>

² Hodnocení výzkumných organizací a hodnocení programů účelové podpory výzkumu, vývoje a inovací dle Metodiky M17+, viz <https://www.vyzkum.cz/FrontClanek.aspx?idsekce=799796>

Materials Modeling, očekáváme 700-800 účastníků). Nedílnou součástí výzkumu bude i řešení zakázek hlavní činnosti pro průmyslové podniky, další výzkumné organizace a vysoké školy. Velká pozornost bude věnována ochraně duševního vlastnictví, zvažovány budou možnosti jeho využití formou licencí a jiných forem komerční spolupráce s podniky, případně založení spin-off firem.

Legislativní rámec

Ve smyslu své zřizovací listiny³ uskutečňuje ÚFM vědecký výzkum v oblasti fyziky materiálů a dalších materiálových věd, přispívá k využití výsledků a zajišťuje infrastrukturu výzkumu, přičemž plně reflektuje národní požadavky v oblasti výzkumu, vývoje a inovací (VaVaI) formulované ve strategických dokumentech Národní politika výzkumu, vývoje a inovací České republiky 2021+ (NP VaVaI 2021+)⁴, Národní výzkumná a inovační strategie pro inteligentní specializaci ČR 2021–2027 (NRIS3)⁵ či Národní priority orientovaného výzkumu, experimentálního vývoje a inovací (Priority)⁶.

Výzkum ústavu je ve střednědobém horizontu směřován do Domén výzkumné a inovační specializace NRIS3 *Pokročilé materiály, technologie a systémy* a *Technologicky vyspělá a bezpečná doprava*, přičemž podporuje zejména klíčové technologie (KETs) *Pokročilé materiály a nanotechnologie* a *Technologicky vyspělá a bezpečná doprava*.

Dlouhodobě se výzkumné aktivity ústavu zaměřují zejména na oblasti a podoblasti Priorit:

Ekonomika založená na znalostech:

Oblast 2. Posílení udržitelnosti výroby a dalších ekonomických aktivit:

- 2.1 Úspornost, efektivita a adaptabilita
- 2.2 Užité vlastnosti produktů a služeb

Oblast 3. Posílení bezpečnosti a spolehlivosti:

- 3.1 Bezpečnost a spolehlivost produktů a služeb
- 3.2 Bezpečnost a spolehlivost procesů

Udržitelnost energetiky a materiálových zdrojů:

Oblast 1. Udržitelná energetika:

- 1.2 Jaderné zdroje energie
- 1.3 Fosilní zdroje energie
- 1.4 Elektrické sítě, včetně akumulace energie
- 1.5 Výroba a distribuce tepla/chladu, včetně kogenerace a trigenerace
- 1.6 Energie v dopravě

Oblast 2. Snižování energetické náročnosti hospodářství:

- 2.1 Snižování energetické náročnosti hospodářství

³ Zřizovací listina Ústavu fyziky materiálů AV ČR, v. v. i., viz <https://www.ipm.cz/group/doc/ZL.pdf>

⁴ Národní politika výzkumu, vývoje a inovací České republiky 2021+, viz <https://www.vyzkum.cz/FrontClanek.aspx?idsekce=913172>

⁵ Národní výzkumná a inovační strategie pro inteligentní specializaci ČR 2021–2027, viz <https://www.mpo.cz/cz/podnikani/ris3-strategie/>

⁶ Národní priority orientovaného výzkumu, experimentálního vývoje a inovací, viz <https://www.vyzkum.cz/FrontClanek.aspx?idsekce=653383>

- 2.2 Nové technologie a postupy s potenciálním využitím v energetice
- Oblast 3. Materiálová základna:
 - 3.1 Pokročilé materiály

Prostředí pro kvalitní život:

- Oblast 2. Globální změny:
 - 2.3 Nebezpečné látky v životním prostředí
- Oblast 4. Environmentální technologie a ekoinovace:
 - 4.1 Technologie, techniky a materiály přátelské k životnímu prostředí
 - 4.3 Minimalizace tvorby odpadů a jejich znovuvyužití

Ústav se systematicky zaměřuje na budování špičkové výzkumné infrastruktury sloužící jak k vlastní VaV činnosti, tak dalším výzkumným organizacím a podnikům. Orientuje se zejména na náročné a vysoce sofistikované experimentální a laboratorní vybavení nezbytné pro excelentní materiálový výzkum, které vyžaduje značnou odbornost obsluhy, obvykle unikátní svou kapacitou a komplexností v rámci ČR.

Pro zajištění výše uvedeného a s ohledem na naplnění cílů NP VaVaI 2021+, ústav vytváří motivující pracovní podmínky a rozvíjí potenciál zaměstnanců a participujících studentů vysokých škol, soustředí se na zvýšení kvality a mezinárodní excelenci VaVaI a podporuje spolupráci mezi výzkumnou a aplikační sférou v oblasti VaVaI. Účastí v programech Strategie AV21⁷ reaguje na aktuální problémy a výzvy, kterým čelí současná společnost. Pokračuje v úspěšné realizaci centra CEITEC – Středoevropský technologický institut a spolupráci s veřejnými vysokými školami, zejména Vysokým učením technickým v Brně a Masarykovou univerzitou.

Velký důraz je kladen na internacionalizaci a mezinárodní spolupráci výzkumných pracovníků, stejně jako na zapojení do evropského výzkumného prostoru formou společných mezinárodních projektů. Jsou respektovány principy Otevřené vědy⁸ podporující kvalitu výzkumu, jeho účinnost a schopnost reagovat na společenské potřeby a zvýšení důvěry ve vědu. Je využíváno prostředků otevřeného sdílení dat FAIR (Findable, Accessible, Interoperable and Re-usable data).

Ústav se zaměřuje na zefektivnění šíření a sdílení znalostí, ochranu duševního vlastnictví a transfer technologií pro lepší využívání poznatků veřejného výzkumu v podnikových inovacích.

Ve svých výzkumných aktivitách plně respektuje etický a společenský rozměr výzkumu, se zohledněním genderových aspektů výzkumu. Dbá na rozvoj rovných příležitostí mužů a žen ve výzkumu a vývoji^{9,10} a reflektuje národní a evropské priority v této oblasti.

⁷ Akademie věd České republiky, Strategie AV21, viz <https://strategie.avcr.cz/>

⁸ Politika EU Open Science, viz https://research-and-innovation.ec.europa.eu/strategy/strategy-2020-2024/our-digital-future/open-science_en

⁹ Strategie rovnosti žen a mužů na léta 2021-2030, viz https://www.vlada.cz/assets/ppov/rovne-prilezitosti-zen-a-muzu/Aktuality/Strategie_rovnosti_zen_a_muzu.pdf

¹⁰ PLÁN PODPORY ROVNOSTI ŽEN A MUŽŮ Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy na léta 2021-2024, viz <https://www.msmt.cz/ministerstvo/plan-podpory-rovnosti-zen-a-muzu-msmt-2021-2024>

Vědecká témata řešená na ÚFM

Dlouhodobou výhodou ÚFM je poměrně homogenní a úzké zaměření řešených vědeckých témat. To umožňuje účinnou spolupráci, synergii znalostí a experimentálního vybavení jednotlivých vědeckých skupin. Dlouhodobou snahou ÚFM je podporovat a vytvářet podmínky zejména pro vědecká témata, která:

- jsou v souladu s vědeckým zaměřením ústavu;
- využívají synergií vědeckých skupin, tedy jsou plánovaná ve spolupráci více skupin ÚFM;
- jsou zaměřena na řešení moderních problémů na hranici poznání, ideálně ve spolupráci s „world leading“ zahraničními pracovišti, a mají potenciál produkovat originální a důležité vědecké poznatky, které budou mít ohlas ve vědecké komunitě;
- zohledňují společenskou relevanci, ať už s výhledem na vývoj materiálů podporující udržitelný rozvoj života na Zemi (materiály pro energetiku, pro uchovávání energie, pro lékařství, materiály umožňující účinnou recyklaci, ...) nebo činností na konkrétních problémech ve spolupráci s aplikační sférou;
- rozvíjejí vědeckou základnu v ČR, tj. spolupracují s akademickými pracovišti a výzkumnými infrastrukturami (CEITEC Nano aj.) např. formou zapojení do Strategie AV21;
- udržují kontakty se strategickými partnery ÚFM, ať už v akademické nebo aplikační sféře.

Mezi hlavní oblasti zájmu splňující výše uvedená kritéria, u kterých očekáváme a budeme podporovat výraznou aktivitu vědeckých pracovníků ÚFM v následujících 5 letech, patří následující témata.

1. Studium a vývoj materiálů pro budoucí udržitelnou společnost (materiály pro vysokoteplotní aplikace, energetiku, dopravu, aditivní technologie, biomateriály, nanomateriály).
2. Vývoj postupů a metod elektronové mikroskopie ve špičkovém materiálovém výzkumu.
3. Návrh a modelování struktury materiálů, popis chování a vlastností materiálů, studium mechanismů porušení a vývoj metod predikce chování a poškozování materiálů.
4. Vývoj experimentálních metod pro stanovení vlastností pokročilých materiálů.

Plány činností jednotlivých vědeckých skupin jsou uvedeny v Příloze.

Příloha: Plán činnosti vědeckých skupin

Plány činností jednotlivých vědeckých skupin jsou detailně rozpracovány níže. Krátkodobé plány se vztahují k rokům 2023-2024, dlouhodobé plány jsou do roku 2027.

Skupina - Víceúrovňové modelování a měření fyzikálních vlastností (VMMFV)

Krátkodobý plán: Hlavní vědeckou náplní skupiny bude studium vlivu povrchů a rozhraní v nanomateriálech na jejich fyzikální vlastnosti. V případě hexagonálního c-AlN na Si{111} je cílem pochopení mechanismu nukleace vláknových dislokací díky velké rozdílnosti mřížkových parametrů. Tyto studie budou realizovány jak z pohledu přímé epitaxe (využití ALD, PLD, PEALD technik ve spolupráci), tak pomocí teoretických modelů a atomárních simulací. Tyto počítačové studie budou realizovány pomocí iontově-kovalentního popisu vazeb s dynamickým přenosem náboje, který v současnosti dokončujeme pro GaN. Dále se budeme zabývat optimalizací syntézy superparamagnetických nanokrychlí oxidů železa, a také funkcionalizací jejich povrchů pomocí oxidů céru a studiem vlastností těchto core-shell nanočástic (ve spolupráci se skupinou EMV). Budeme také pokračovat v popisu mechanismů vedoucích ke vzniku inverzního Hallova-Petchova jevu v nanokrystalických materiálech, a to pomocí kombinace experimentů a atomárních simulací. Tato témata budou doplněna o již velmi pokročilé studie plastické deformace bcc a hcp kovů. Konkrétně se bude jednat o popis jejich neschmidovského chování a objasnění procesů nukleace a růstu dvojčat s cílem vyvinout metody pro řízení dvojčatění v hcp kovech s nízkou krystalovou symetrií.

Dlouhodobý plán: V dlouhodobějším horizontu se zaměříme na rozšíření iontově-kovalentního popisu vazeb pro systém (Al,Ga,In)-N-Si, zahrnující zejm. popis struktur, povrchových rekonstrukcí, vzájemných interakcí a charakterizace rekombinační aktivity excitonů v okolí vláknových dislokací ve všech těchto materiálech. Budeme také detailněji studovat vlastnosti superparamagnetických nanočástic v AC magnetických polích za frekvencí od 500 kHz do 2 MHz, které umožní magnetickou hypertermii nádorů s využitím mnohem nižší amplitudy magnetického pole. Protože jsou taková měřicí zařízení v současnosti nedostupná, plánujeme k tomuto účelu rozšířit námi navrženou aparaturu pro měření specifické rychlosti absorpce (SAR), která v současnosti funguje pouze do cca 300 kHz. Funkcionalizované nanočástice oxidů železa budou využity pro studium interakce s nádorovými buňkami (ve spolupráci). Katalytické vlastnosti nanočástic céru a funkcionalizovaného hořčíku, příp. materiálů na bázi uhlíku, budou studovány pro elektrolýzu vody na vodík a kyslík a jejich využití v palivových článcích (ve spolupráci se skupinou SFT). V případě hcp materiálů bude hlavním cílem pochopení mechanismu dvojčatění v nanočásticích a mechanismu nukleace neklasických dvojčatových hranic s ohledem na jejich plazmonické vlastnosti.

Skupina - Struktura fází a termodynamika (SFT)

Krátkodobý plán: Skupina rozvíjí v teoretické oblasti metody a postupy umožňující modelování fázových diagramů komplexních materiálů. V krátkodobém horizontu se zaměřujeme na aplikaci metody CALPHAD a bude pokračovat ve vývoji univerzálních modelů pro popis intermetalických fází v různých pokročilých materiálech se stejnou či příbuznou krystalovou strukturou. V souvislosti s tím rozvíjíme experimentální metody pro studium fázových diagramů důležitých binárních a ternárních soustav včetně měření tepelných kapacit intermetalických fází, které umožní kvalitnější termodynamický popis. Další oblastí je výzkum termoelektrik s half-Heuslerovou strukturou z řady slitin T-Zn-Sb, kde T je přechodový kov s elektronovou strukturou 3d, 4d nebo 5d, zejména Ni, Pd, Pt. Studium struktury, termoelektrických, fyzikálních a mechanických vlastností, vše ve spolupráci s Př.F. MU a s Ústavem fyzikální chemie University ve Vídni. Průběžně pokračují sorpční experimenty orientované na chemisorpci vodíku v pevných sorbentech. Cílem zůstává nalezení materiálu vhodného pro ukládání sekundární (již vyrobené) energie v podobě chemické energie vodíku. Dále je program skupiny soustředěn na možnosti, které nabízí tzv. multiprinciple-elements-alloys (MPEAs). Jde o materiály původně vyvinuté pro konstrukční aplikace, u nichž byly v nedávné minulosti objeveny zajímavé funkční vlastnosti – mj. i jejich potenciál pro ukládání vodíku.

Dlouhodobý plán: V oblasti dlouhodobého teoretického rozvoje semiempirické metody CALPHAD jsme zapojeni do spolupráce na vývoji nových, fyzikálně lépe podložených modelů pro tvorbu nových databází 3. generace, které umožňují popis chování soustav i pro nižší než pokojové teploty a řeší některé matematické problémy na vysokých teplotách. Členové skupiny jsou součástí mezinárodní pracovní skupiny, zaměřené na tuto problematiku. Dále budou pokračovat práce na modelech zahrnujících vliv velikosti částice na fázové transformace ve složitějších soustavách (nanomateriály). Bude pokračovat i vývoj termodynamických databází pro studium pokročilých materiálů. V experimentální oblasti plánujeme systematické studium fázových diagramů pokročilých materiálů v celém koncentračním a tepelném rozsahu, termodynamických vlastností intermetalických fází a chování vodíku

v materiálech perspektivních pro skladování energie. Dále se budeme zabývat studiem jednofázových sloučenin TZnSb (T viz výše), objasnění jejich krystalové struktury v kontextu celé řady 3d/4d/5d přechodových prvků metodami analytické elektronové mikroskopie a termické analýzy, ale také vlivem defektů na jejich strukturu, fyzikální a mechanické vlastnosti. V oblasti vodíkových technologií budeme rozšiřovat naše zaměření na další materiály, a to zejména na slitiny obsahující Lavesovy fáze, materiály na bázi LaN_5 , aj. Budeme se soustředit i na komplexní kompozice obsahující nano-strukturní komponenty, které vykazují příznivý katalytický efekt na sorpci vodíku. Zatímco do nedávné minulosti spočívalo těžiště v oblasti mobilních aplikací, nyní je cílem nalezení vhodných materiálů pro jakékoliv, tedy i stacionární aplikace. To povede k rozšíření spektra možných kandidátních materiálů. Tento trend budeme v rámci naší skupiny reflektovat.

Skupina - Elektrické a magnetické vlastnosti (EMV)

Krátkodobý plán: Výzkum bude kombinovat experimentální a teoretické metody při hledání vztahů mezi strukturou a vlastnostmi perspektivních materiálů. Jejich elektrické a magnetické vlastnosti budou měřeny v širokém rozmezí teplot a vnějších polí. Kvantově-mechanické výpočty budou synergicky doplňovat prováděné experimenty tak, že budou získávány poznatky na úrovni jednotlivých atomů, které jsou experimentálně jen velmi těžko dosažitelné. Získané výsledky budou využity např. při analýze vlastností slitin cínu v rámci společného projektu s VŠCHT Praha. Pokračovat bude také spolupráce se skupinou SFT v oblasti kvantově-mechanických výpočtů parametrů potřebných pro termodynamické modelování metodou CALPHAD. Další perspektivní směr výzkumu se zaměří na vlastnosti magnetických nanočástic, které jsou využitelné v hypertermii nádorů (spolupráce se skupinou VMMFV). Prohloubena bude také spolupráce se skupinou KL v oblasti teoretické analýzy akustických emisí materiálů. V oblasti teoretických výpočtů bude pokračovat spolupráce s vědci z MIT (USA), v rámci níž jsou vyvíjeny softwarové nástroje pro nastupující generaci kvantových počítačů, které radikálně urychlí budoucí simulace materiálů.

Dlouhodobý plán: Cílem výzkumu bude synergicky propojit zkoumání struktury a vlastností materiálů pomocí nejmodernějších experimentálních a teoretických metod. Jedním z hlavních směrů bude analýza vlivu defektů na magnetismus materiálů. Zvláštní pozornost bude věnována kovovým systémům s vodíkem jako bodovým defektem a jeho interakcemi s okolím. V oblasti komplexních magnetických systémů se budeme orientovat na ty, které mohou být použity při hardwarové realizaci budoucích kvantových počítačů.

Skupina - Vysokocyklová únava (VCÚ)

Krátkodobý plán: V následujícím období bude skupina pokračovat ve výzkumu mechanismů zavírání únavové trhliny, se zaměřením především na vznik oxidů na lících trhliny v oblasti prahových hodnot součinitele intenzity napětí. Cílem těchto snah je zpřesnit predikci zbytkové životnosti konstrukčních materiálů. Tyto fundamentální poznatky budou prakticky aplikovány na problémy inženýrské praxe v rámci spolupráce s Bonatrans Group nebo Sidenor. Skupina se bude dále věnovat popisu únavových mechanismů uplatňujících se při cyklickém zatěžování polymerních materiálů. Úsilí bude věnováno zejména tvorbě modelů pro šíření únavových trhlin v materiálech s vnitřní architekturou pomocí MKP výpočtů. Dalším významným tématem v rámci skupiny je charakterizace únavových vlastností aditivně vyráběných materiálů s anizotropickou strukturou a probíhající deformačně indukovanou martenzitickou transformací. V neposlední radě budou studovány deformační mechanismy při vysokých rychlostech cyklického zatěžování v materiálech s BCC mřížkou. Pokračuje také úspěšná spolupráce s PBS Velká Bíteš ve výzkumu únavového poškození vysokoteplotních materiálů.

Dlouhodobý plán: V dlouhodobém horizontu se skupina hodlá zabývat charakterizací deformačních mechanismů v materiálech vyráběných pomocí metod aditivní výroby, vyznačujících se specifickou strukturou. Cílem bude popsat základní deformační mechanismy a následně optimalizací procesních parametrů vytvářet materiály s různou dislokační substrukturou, krystalografickou texturou a lokální variací energie vrstevné chyby. Na základě nabytých poznatků budou následně navrženy pokročilé materiály s výjimečnými únavovými vlastnostmi. Skupina se bude dále věnovat návrhu pokročilejších modelů pro popis šíření únavových trhlin v materiálech s komplikovanou vnitřní stavbou. Dalším významným tématem bude zkoumání únavové odolnosti polymerních materiálů a polymerních kompozitů a popisu jejich základních deformačních mechanismů na makroskopické a mikroskopické úrovni. Dalšími oblastmi výzkumu budou také bio kompatibilní materiály a gigacyklová únava. V aplikační sféře plánujeme pokračovat v úspěšné spolupráci s Bonatrans Group, Unipetrol, PCCL nebo PBS Velká Bíteš.

Skupina Perspektivní vysokoteplotní materiály (PVM)

Krátkodobý plán: V krátkodobém výhledu dvou let program zohledňuje běžící projekty základního a aplikovaného výzkumu, případně granty, o které se vědečtí pracovníci skupiny v současné době ucházejí. Nosným tématem řešeným v rámci projektu EXPRO je příprava, struktura a vlastnosti špičkových ODS slitin, a to s výhledem na komercializaci materiálu pro komponenty extrémně namáhané při teplotách nad 1000°C. Základní výzkum vlastností materiálů pro aplikace při vysokých homologických teplotách v relaci k jejich mikrostruktuře se bude zaměřovat zejména na nové slitiny s vysokou konfigurační entropií (HEAs), pokročilé austenitické a feritické oceli, slitiny ZrNb a superslitiny na bázi Ni a Co. Pro některé z těchto materiálů plánujeme srovnávací studie mezi strukturními stavy UFG, po 3D tisku a po klasických tepelně-mechanických postupech přípravy. V oblasti rozvoje experimentálních technik budeme usilovat o optimalizaci funkce a komercializaci nového creepového stroje s přímým zatížením a laserovou detekcí deformace a dále o vývoj metodiky akustické emise vhodné pro sledování kumulace mikrostrukturních lomových událostí v terciálním stádiu creepu.

Dlouhodobý plán: Do roku 2027 budeme pracovat na obecnějším tématu, které se týká vlivu intersticiálních příměsí na přípravu, strukturu a vlastnosti materiálů jak pro vysokoteplotní, tak i pro biomedicínské aplikace. Na dalším rozvoji jaderné energetiky se budou významně podílet slitiny na bázi Zr, u nichž je nutné posoudit jejich vlastnosti ve vztahu k obsahu vodíku. Vliv kyslíku na kinetiku rekrystalizace námi vyvíjených ODS slitin bude nutné sledovat vzhledem ke snaze o redukci hustoty hranic zrn, a to i s výhledem na možnou žádost o ERC grant. Námi publikované práce o biokompatibilitě slitin NiTi modifikovaných vodíkem otevřely nové možnosti pro výzkum vlivu intersticiálních příměsí na vlastnosti dalších bio-kompatibilních materiálů na bázi např. austenitických ocelí nebo titanu. V této oblasti budeme posilovat spolupráci s biomedicínskými obory zaměřenou na studium imunitních reakcí při jejich aplikaci. Skupina dlouhodobě usiluje o uplatnění modelových výpočtů založených na termodynamických extrémních principech, 3D DDD a nově také ab-initio metodách při interpretaci získaných experimentálních dat (spolupráce se skupinou EMV). Očekáváme, že tato synergie přispěje např. k optimalizaci precipitace a morfologie sekundárních fází v nových ODS slitinách a pomůže zvýšit jejich strukturní stabilitu a odolnost proti degračním procesům.

Skupina Křehký lom (KL)

Krátkodobý plán: Z pohledu běžících projektů se jedná zejména o vývoj nových dispersně zpevněných ODS feritických ocelí vhodných pro použití v energetice. Zde se mimo studium deformačních mechanismů a pevnostního chování koncentruje úsilí na objasnění mechanismů degradace v kontaktu s kapalnými kovy. Dalším řešeným tématem jsou funkční keramické kompozitní systémy obsahující feroelektrika, kde jsou na vyvíjených materiálech studovány elektro – mechanické interakce s podporou numerických metod a predikce lomové mechanického chování na multimateriálových rozhraních. Z hlediska interakce rozhraní více materiálů se také jedná o studium chování spojů u vysokoteplotních vysokoentropických keramických systémů podobně jako spojů kovových materiálů částečně připravených aditivními technologiemi. V obou případech se studium zaměřuje na vzniklou mikrostrukturu v oblasti spoje a její úlohu v lomové mechanickém chování součásti při extrémních podmínkách, jakými jsou vysoké teploty, rychlé zatěžování i degradace vlivem prostředí. Slibně se rozvíjí i téma vývoje nových vysoce odolných a ekonomicky výhodných kompozitních systémů zejména na bázi geopolymérů s disperzí nano vláken celulózy. Tyto práce navazují na dlouholetou tradici charakterizace vláken vyztužených kompozitů s keramickou, polymerní či hybridní maticí, která stále zaujímá své pevné místo v probíhajícím výzkumném programu skupiny.

Dlouhodobý plán: Z dlouhodobého hlediska rozvoje skupiny je důraz kladen na přípravu nových strukturovaných materiálů navržených na základě numerických predikcí, zejména pak v oblasti slitin s disperzí ovlivněnou mikrostrukturou, multimateriálových heterostruktur, či metamateriálů. Zde kromě již používaných postupů přípravy nových materiálů, jakými jsou chemická syntéza, mechanické legování, prášková metalurgie bude úsilí zaměřeno na moderní formy přípravy multikomponentních systémů aditivními technologiemi. Dalším dlouhodobým cílem skupiny je rozvíjet schopnosti v charakterizaci vztahu mikrostruktury a deformačního, pevnostního a lomové mechanického chování nových i stávajících materiálů, jejich rozhraní s důrazem na pochopení základních mechanismů studovaných při různých teplotách, způsobech zatěžování a vlivech prostředí. Zde bude rozvíjena

zejména charakterizace menších objemů s účinnou korelací na makroskopické chování podpořenou výpočtovými analýzami.

Skupina Nízkocyklová únava (NCÚ)

Krátkodobý plán: V rámci aktuálně řešených projektů se práce skupiny nízkocyklové únavy zaměří na studium mikrostruktury nově vyvíjených práškových materiálů s nano-disperzí částic na bázi oxidů a nitridů, které jsou do komerčních prášků přidávány např. metodou granulárního vymrazování nebo mechanickým legováním. V návaznosti na tento vývoj, je skupina rovněž zapojena do charakterizace mikrostrukturních aspektů 3D tištěných materiálů z modifikovaných prášků. Hlavním tématem je však studium mechanismů únavového poškození vysokoteplotních materiálů připravených z těchto prášků metodou LPBF od makro- až po nano-rozměr. Především jde o studium specifické textury 3D tištěných materiálů a typy interakcí dislokací s jemnou disperzí zpevňujících částic. Získané mikrostrukturní poznatky o degradačních mechanismech budou korelovány s makroskopickou odezvou materiálu na únavové zatěžování. Dalším okruhem výzkumu jsou vysokoteplotní interakční mechanismy niklových superslitin, kde je pozornost věnována synergickému účinku únavy a creepu, který je klíčový pro optimalizaci konstrukce axiálních a radiálních lopatek plynových turbín. V oblasti víceosého cyklického namáhání je pozornost věnována mikrostrukturním změnám (především martenzitické transformaci) u slitin 316L a 304L za zvýšených teplot ve dvou specifických zátěžných módech (in-phase a out-of-phase).

Dlouhodobý plán: Z hlediska dlouhodobého rozvoje výzkumných činností se skupina profiluje především do oblasti charakterizace a studia únavových vlastností 3D tištěných materiálů u nichž se předpokládají lepší mechanické vlastnosti než u materiálů vyrobených konvenčním způsobem. Do skupiny perspektivních materiálů vhodných pro výrobu 3D tiskem se řadí nové typy niklových superslitin s modifikovaným chemickým složením, u nichž je možné optimalizací tepelného zpracování ovlivnit výslednou mikrostrukturu dle konkrétních aplikačních potřeb. Dalším dlouhodobým záměrem je rozvíjet poznatky ODS slitin ve vztahu k nekonvenčním způsobům výroby (cold-spray) a výsledné mikrostruktuře, která se propíše do mechanických a fyzikálních vlastností materiálu. Výhledově bude skupina usilovat o větší propojení své silné experimentální činnosti s fyzikálními modely popisujícími únavový proces, modelování krystalové plasticity a návaznost na predikční modely u pokrokových materiálů pro extrémní podmínky jako jsou např. niklové superslitiny nebo multi-principiální slitiny.

Skupina Speciální problémy lomové mechaniky a únavy materiálů (FRACTIGUE)

Krátkodobý plán: Vyvinout spolehlivé, experimentálně podložené simulační nástroje pro časově závislou analýzu pravděpodobnosti poruchy konstrukčních prvků vyrobených z vysokohodnotného betonu namáhaných mnohokrát opakovaným zatížením. Fenomény autogenního vyhojení vysokohodnotného betonu při únavovém poškození konstrukčních prvků budou zkoumány prostřednictvím experimentů a počítačových simulací. Kvantifikace samovyhojovacích jevů, jejich vliv na zvýšení životnosti konstrukcí/prvků a samovyhojovací procesy budou studovány na vybraných jemnozrnných kompozitech na bázi křehké matrice s konopným vláknem jako nositelem vody k defektu. Další práce budou zaměřeny na únavové vlastnosti ve vysokocyklové a gigacyklové oblasti, pro pokročilé stavební materiály, jako jsou některé speciální typy ocelí nebo materiály s vysokou užitnou hodnotou vhodné pro použití pro cyklicky namáhané pozemní stavby.

Dlouhodobý plán: V následujícím pětiletém období se budeme zabývat zejména únavovými vlastnostmi pokročilých stavebních materiálů pro vysoké počty cyklů (10^7 - 10^{10}), kde je třeba ještě vyjasnit řadu fundamentálních otázek týkajících se změny mechanismu porušení v gigacyklové oblasti. Ve spolupráci se zahraničními partnery se budeme věnovat popisu vlivu frekvence zatěžování (2 Hz, 200 Hz, 20 kHz) na mechanickou odezvu materiálů, kde nízká a vysokofrekvenční zkoušky vedou u některých materiálů k řádově různým výsledkům únavové životnosti. Výzkum vztahu mezi strukturou a vlastnostmi materiálů produkovanými aditivními technologiemi a betonových recyklátů, vč. mechanismů jejich porušení, jsou velmi aktuální. Využití upraveného hrubého recyklátu jako kameniva, případně ve smysluplné kombinaci s recyklátem ze zděných budov může výrazně přispět k využití této druhotné suroviny.