

Témy dizertačných prác 2026/2027

Physics of Condensed Matter and Acoustics

Fyzika kondenzovaných látok a akustika

Téma 1.

Školiteľ/ Supervisor: RNDr. Marek Mihalkovič CSc.

Konzultant/ Consultant: Doc. Ing. Tomáš Bučko PhD.

Jazyk záverečnej práce: EN

Topic title (EN): Search for kinetically blocked or metastable alloys and compounds by atomistic simulations

Názov témy (SK): Hľadanie kineticky blokováných a metastabilných zliatin a zlúčenín prostredníctvom atomistických simulácií

Goals (EN): Search for new kinetically blocked or metastable alloy-compound phases by modelling and atomistic simulations, using a DFT package in machine learning mode, and replica exchange method.

Ciele (SK): Hľadanie doposiaľ neobjavených kineticky zablokováných fáz zliatin a zlúčenín metódou DFT v režime strojového učenia silových polí v kombinácii s metódou zámeny replík.

Annotation (EN): Experimentally known phase may or may not be in state of thermodynamic equilibrium, their apparent “stability” may be just a consequence of kinetically blocked transformation to a hypothetical truly stable phase. Similarly, variation of kinetic circumstances during alloy-compound formation may lead to formation of so far unknown metastable structure with possibly distinct physical properties compared with the previously known compound structure. By controlling circumstances during phase formation during atomistic simulations based on density functional and machine learning, we will screen existence of so far unknown minima of potential energy for series of candidate chemical compositions.

Anotácia (SK): Experimentálne známe fázy môžu a nemusia byť v stave termodynamickej rovnováhy, ich “stabilita” môže byť výsledkom kinetického zablokovania transformácie na hypotetickú stabilnú fázu. Podobne, zmena kinetických okolností pri vzniku danej zlúčeniny môže viesť k formovaniu doposiaľ neznámej metastabilnej štruktúry s potenciálne odlišnými fyzikálnymi vlastnosťami v porovnaní s experimentálne známou fázou. Kontrolou parametrov pri vzniku štruktúry daného zloženia počas atomistických simulácií, založených na metodike funkcionálu hustoty a strojového učenia, budeme hľadať doposiaľ nezmapované minimá potenciálnej energie pre sériu vopred zvolených chemických zložení.

Téma 2.

Školiteľ/ Supervisor: RNDr. Robert Turanský, PhD.

Konzultant/ Consultant: RNDr. Kamil Tokár, PhD.

Jazyk záverečnej práce: EN

Topic title (EN): First-principles simulations of temperature-dependent electronic structure in semiconductor

Názov témy (SK): Prvoprincípové simulácie teplotne závislého elektrónového systému v polovodiči

Goals (EN): Design of First-Principles and statistical models for temperature-dependent electronic and optical characteristics of semiconductor perovskites with application in photovoltaics. Methods will be based on a quantum mechanical description of electrons and lattice vibrational states.

Ciele (SK): Návrh prvoprincípových a štatistických modelov pre teplotne závislé elektronické a optické charakteristiky polovodičových perovskitov s aplikáciou vo fotovoltaike. Metódy budú vychádzať z kvantovomechanického opisu elektrónov a vibračných stavov mriežky.

Annotation (EN):

The PhD candidate will focus on the modeling of crystal structures using a modern numeric technique based on the atomic approach and the fundamental principles of quantum mechanics. The primary method for these simulations will be Density Functional Theory (DFT), which allows for the efficient solution of complex quantum mechanical problems of many-electron systems, such as are represented by a real condensed matter. The work will focus on simulations of lattice dynamics- the phonon system, and its interaction with the electronic system. Based on this, it will be possible to predict, within the quasi-harmonic approximation, the region of dynamic stability, thermodynamic properties (e.g., thermal expansion), and the influence of thermal vibrations of the crystal on its electronic properties depending on the thermodynamic temperature and external pressure. The computationally obtained data will be compared with experimental measurements of optical absorption and photoluminescence, respectively, or to interpret real experiments. The considered substances under investigation will be perovskite structures grown in the form of films/nanostructures containing heavy metals (Pb, Cs) and halides (Cl, Br, I), which are suitable as light absorption layers in a new class of photovoltaic cells.

Anotácia (SK):

Doktorant sa bude zaoberať aktuálnymi modelovacími technikami kryštálovej štruktúry vychádzajúcimi atomistického prístupu a základných princípov kvantovej mechaniky. Základnou východiskovou metódou pre simulácie je teória hustotového funkcionálu (DFT), ktorá umožňuje efektívne riešiť zložitú kvantovomechanickú formuláciu mnohoelektrónových systémov, ako sú reálne látky kondenzovaného stavu. Zámerom práce budú simulácie mriežkovej dynamiky – fonónového systému a jeho spriahnutie-kapling s elektrónovým systémom. Na základe toho bude možné predpovedať v kvázi-harmonickej aproximácii

oblasť dynamickej stability, termodynamické vlastnosti, teplotnú rozťažnosť, vplyv termálnych kmitov kryštálu na jeho elektronické vlastnosti v závislosti od parametra termodynamickej teploty a vonkajšieho tlaku. Výpočtovo získané dáta bude možné porovnávať s experimentálnymi meraniami optickej absorpcie a fotoluminiscencie, resp. interpretovať reálne experimenty. Predpokladanými substanciami budú perovskitové štruktúry vo forme filmov/nanoštruktúr obsahujúce ťažké kovy (Pb, Cs) a halidy (Cl, Br, I), ktoré sú vhodné ako optické absorbčné vrstvy v novej triede fotovoltických článkov.

Téma 3.

Školiteľ/ Supervisor: Ing. Peter Švec, PhD.

Konzultant/ Consultant: Ing. Peter Švec, DrSc.

Jazyk záverečnej práce: EN

Topic title (EN): Application of the concept of HEA atoms substitution in development of new materials prepared by different quenching and processing rates

Názov témy (SK): Aplikácia konceptu substitúcie HEA atómov pri vývoji nových materiálov pripravených rôznymi ochladzovacími a žihacími rýchlosťami

Goals (EN):

Unambiguous identification of structures and chemical ordering on sub-mm, micro-mm and atomic scales in systems derived from classical HEAs of the FeCoNiMnAl type by alloying with selected atoms and systems based on FeNi, FeCo and AlMn prepared by different quenching rates.

Determination of compositional ranges for preparation of selected systems, of stability, kinetics and thermodynamics of structural changes and their control mechanisms, correlation with development of physical properties and optimization of parameters typical for the specific type of HEA

Generalization of the concept of HEA atoms to wider class of materials (especially magnetics, ceramics, catalytic surfaces, etc.)

Ciele (SK):

Jednoznačná identifikácia štruktúr a chemického usporiadania na sub-mm, mikro až po atomárnu škálu v systémoch odvodených z klasických HEA typu FeCoNiMnAl legovaním vybranými atómami a systémov na báze FeNi, FeCo a AlMn pripravených rôznymi rýchľ. Chladenia.

Určenie kompozičných oblastí nožnej prípravy vybr. systémov, stability, kinetiky a termodyn. štrukt. zmien a ich riadiacich mechanizmov, korelácia s vývojom fyzikálnych vlastností a optimalizácia parametrov typických pre daný typ HEA.

Zobecnenie koncepcie HEA atómov na širšiu triedu materiálov (najmä magnetiká, keramiky, katalyt. povrchy a pod.)

Annotation (EN):

Focus of the thesis is preparation and implementation of the concept of substitution of existing equilibrium Wyckoff crystallographic positions in known equilibrium crystalline lattice by different types of majority metal atoms consisting of a set of 3-5 additional/other suitable atoms. These atoms, so-called HEA atoms, will be selected in accordance with the principle of High Entropy Alloys (HEA) or compounds e.g. ceramics, dielectrics or oxides, to form a similar, mutually shared crystallographic structure with lattice parameters comparable to those of the original equilibrium unit cell and are inserted for the purpose of controlled

optimization of physical properties of the system. Objects of application of such concept will be alloys derived from classical known HEA but also systems forming metallic glasses of metal-metalloid type, porous catalytic materials, selected ceramics based on carbides and borides or oxides, using possibility to prepare systems in non-equilibrium state via different cooling rates.

Anotácia (SK):

Práca bude zameraná na implemáciu konceptu substitúcie kryštalografických pozícií v atomárnej mriežke obsadených majoritnými atómami kovov v materiáli súborom 3-5 ďalších/iných vhodných atómov. Tieto atómy, tzv. HEA atómy, budú vybrané v súlade s koncepciou vysokoentropických zliatin (High Entropy Alloys, HEA) alebo potenciálne zlúčenín v prípade keramik, dielektrík a pod. tak, aby mali podobnú štruktúru a rozmery elementárnej bunky ako tvoril pôvodný substituovaný atóm za účelom riadenej optimalizácie fyzikálnych vlastností skúmaného systému. Objektom aplikácie tejto koncepcie budú nielen zliatiny odvodené od doteraz známych klasických zliatin typu HEA ale tiež systémy tvoriace kovové sklá typu kov-polokov, vybrané keramiky na báze karbidov a boridov, porézne katalytické materiály a pod. za súčasného využitia možnosti prípravy prekursorov v termodynamicky nerovnovážnom stave využitím rôznych rýchlosti ochladzovania prekursora z východiskového (zvyčajne roztaveného alebo vysokoteplotného) stavu.

Téma 4.

Školitel'/ Supervisor: Ing. Peter Švec, PhD.

Konzultant/ Consultant: Ing. Peter Švec, DrSc.

Jazyk záverečnej práce: EN

Topic title (EN): Development and structure characterization of rare-earth free hard magnetic systems based on Al-Mn and Fe-Ni prepared by non-conventional solidification methods

Názov témy (SK): Vývoj a charakterizácia štruktúr magneticky tvrdých systémov bez obsahu vzácnych zemín na báze Al-Mn a Fe-Ni pripravených nekonvenčnými metódami tuhnutia taveniny

Goals (EN):

Replacement of rare-earth elements in permanent magnets via design of novel compositions leading to formation of hard magnetic phases.

Correlation between formation of hard magnetic phases and microstructure in Al-Mn and Fe-Ni systems.

Identification of atomic ordering processes and processing parameters leading to enhanced figure of merit of designed permanent magnets.

Ciele (SK):

Náhrada prvkov vzácnych zemín v permanentných magnetoch prostredníctvom návrhu nových zložení vedúcich k tvorbe tvrdých magnetických fáz.

Korelácia medzi tvorbou tvrdých magnetických fáz a mikroštruktúrou v systémoch Al-Mn a Fe-Ni.

Identifikácia procesov usporiadania atómov a parametrov spracovania vedúcich k zvýšeniu hodnoty energetického súčinu navrhnutých permanentných magnetov.

Annotation (EN):

Establishment of microstructural-magnetic correlation and identification of processing parameters governing the formation of hard magnetic phases.

Development of preparation and processing routes for maximization of the figure of merit via fine composition tuning, refinement of processing and structural evolution of hard magnetic phases . Detailed microstructural and thermodynamic analysis using cutting edge methods and techniques.

Anotácia (SK):

Stanovenie mikroštruktúrne-magnetickej korelácie a identifikácia parametrov spracovania riadiaceho tvorbu tvrdých magnetických fáz.

Vývoj ciest prípravy a spracovania na maximalizáciu hodnoty energetického súčinu prostredníctvom optimalizácie zloženia, metód spracovania a cieleného vývoja štruktúry tvrdých magnetických fáz.

Podrobná mikroštruktúrna a termodynamická analýza využívajúca špičkové metódy a techniky.

Téma 5.

Školitel/ Supervisor: Ing. Irena Gejšová Janotová, PhD.

Konzultant/ Consultant: Ing. Peter Švec, DrSc.

Jazyk závěrečné práce: EN

Topic title (EN): Development of low-temperature lead free solders based on multicomponent high-entropy systems

Názov témy (SK): Vývoj nízkoteplotných bezolovnatých spájk na báze viaczložkových vysokoentropických systémov

Goals (EN): The main objectives of the dissertation will include the following tasks:

1. Design, preparation and characterization of new multicomponent and high-entropy lead-free alloys for soldering at low and high temperatures.
2. Analysis of microstructure and chemical composition of intermetallic phases and determination of their role in extending the service life and increasing the mechanical and chemical reliability of soldered joints.
3. Validation of selected prepared real systems with regard to the properties of solders and joints and their estimated mechanical and time-temperature behavior in a wider range of prospective operating temperatures and environments.

Ciele (SK): K hlavným cieľom dizertačnej práce bude patriť:

1. Návrh, príprava a charakterizácia nových multikomponentných a vysokoentropických zliatin bez obsahu olova pre spájkovanie pri nízkych a vysokých teplotách.
2. Analýza mikroštruktúry a chemického zloženia intermetalických fáz a určenie ich úlohy pre predĺženie životnosti a zvýšenie mechanickej a chemickej spoľahlivosti spájkovaných spojov.
3. Validácia vybraných pripravených reálnych systémov s ohľadom na vlastnosti spájk a spojov a ich odhadované mechanické a časovo-teplotné správanie v širšom intervale perspektívnych pracovných teplôt a prostredí.

Annotation (EN):

The formation of intermetallic compounds (IMCs) at the substrate-solder interface is needed for the formation of a reliable solder joint as the IMC layer constitutes a metallurgical bond between the substrate and the solder. The morphology, composition and thickness of IMC layers have strong influence on the mechanical and time-temperature behavior of the joints. Despite the advancements in lead-free solders in the past decades, none of the existing solders is suitable to completely replace the Sn–Pb alloy. The dissertation thesis is expected to provide significant advancements of existing state-of-the-art knowledge in the field of lead-free solders for diverse electronic and mechanical applications. It will focus on the application of high-entropy alloys as solder basis, exploring the effects of various parameters on the thermodynamics of formation and growth kinetics of IMCs in a series of solder joints. The

thesis research will start with assessment of conventional Sn-based lead free solders which will lead to selection and preparation of promising novel solder alloy compositions. Binary, ternary and multicomponent alloys for low and high temperature joining will be prepared in bulk or sheet (ribbon) form. The effect of composition and processing conditions (atmosphere, cooling rate, metal purity) on the alloy phase evolution will be studied. Microstructure, stability and physical properties of the solder alloys and prepared joints will be investigated by a combination of optical and electron microscopies, X-ray diffraction, thermoanalytical and electromechanical methods as well as by indentation techniques and wetting experiments. Solder joints will be prepared from lead-free solder alloys selected from a convenient set of high-entropy alloy systems. Long-term reliability, expected lifetime and performance of soldered joints at elevated temperatures as well as at sub-ambient temperatures (short-term and long-term) will be integral part of the research. The effects of temperature, aging time, alloying elements, and solder microstructure together with the role of IMC chemistry in solder joints quality will be thoroughly investigated.

Anotácia (SK):

Tvorba intermetalických zlúčenín (IMC) na rozhraní substrát-spájka je potrebná pre vytvorenie spoľahlivého spájkovaného spoja, pretože vrstva IMC predstavuje metalurgickú väzbu medzi substrátom a spájkou. Morfológia, zloženie a hrúbka vrstiev IMC majú silný vplyv na mechanické a časovo-teplotné správanie spojov. Napriek pokroku v bezolovnatých spájkach v posledných desaťročiach nie je žiadna z existujúcich spájk vhodná na úplné nahradenie zliatiny Sn-Pb. Očakáva sa, že dizertačná práca prinesie významný pokrok v existujúcich najmodernejších poznatkoch v oblasti bezolovnatých spájk pre rôzne elektronické a mechanické aplikácie. Cieľom bude preskúmanie možností aplikácie zliatin s vysokou entropiou ako základu spájky a stanovenie vplyvu rôznych parametrov na termodynamiku a kinetiku tvorby a rastu IMC v sérii spájkovaných spojov. Výskum v dizertačnej práci bude vychádzať z poznatkov získaných na konvenčných bezolovnatých spájkach na báze Sn a zameria sa na návrh, výber a prípravu sľubných nových zložení spájkovacích zliatin. Binárne, ternárne a viaczložkové zliatiny na spájanie pri nízkych a vysokých teplotách budú pripravené v objemovej alebo páskovej forme. Stanoví sa vplyv zloženia a podmienok spracovania (atmosféra, rýchlosť chladenia, čistota kovu) na fázový vývoj zliatiny. Mikroštruktúra, stabilita a fyzikálne vlastnosti spájkovaných zliatin a pripravených spojov budú skúmané kombináciou optickej a elektrónovej mikroskopie, rtg. difrakcie, termoanalytických a elektromechanických metód, ako aj indentačnými technikami a zmáčacími experimentmi. Spájkované spoje budú pripravené z bezolovnatých spájkovaných zliatin vybraných z vhodnej sady systémov zliatin s vysokou entropiou. Neoddeliteľnou súčasťou výskumu bude dlhodobá spoľahlivosť, očakávaná životnosť a kvalita spájkovaných spojov pri zvýšených teplotách, ako aj pri teplotách nižších ako je okolitá teplota (krátkodobo a dlhodobo). Dôkladne sa preskúmajú vplyvy teploty, času starnutia, legujúcich prvkov a mikroštruktúry spájky spolu s úlohou zloženia IMC na kvalitu spájkovaných spojov.

Téma 6.

Školitel'/ Supervisor: Ing. Irena Gejdoš Janotová, PhD.

Konzultant/ Consultant: Ing. Peter Švec, DrSc.

Jazyk záverečnej práce: EN

Topic title (EN): Effect of heat extraction gradient and elemental substitution on structure formation and physical properties of rapidly quenched Fe–Co–Ni–Al–Mn based high-entropy alloys

Názov témy (SK): Vplyv gradientu odvodu tepla a substitúcie prvkov na formovanie štruktúry a fyzikálne vlastnosti rýchlo ochladzovaných vysokoentropických zliatin na báze Fe–Co–Ni–Al–Mn

Annotation (EN):

The PhD project focuses on physical mechanisms of structure formation in compositionally complex metallic systems under strongly non-equilibrium conditions. High-entropy and medium-entropy alloys based on Fe–Co–Ni–Al–Mn in equiatomic and semi-equiatomic compositions, modified by substitution with V, Cr, and Cu, will be investigated. Materials will be prepared using three rapid-quenching techniques with different heat extraction gradients, enabling control of solidification kinetics, diffusion suppression, and chemical disorder. The research will address relationships between solidification conditions, phase constitution and microstructure (FCC, BCC and ordered B2 phases, local short-range chemical ordering and nanoscale segregation) and their influence on magnetic and electrical transport properties. Particular attention will be paid to the roles of chemical complexity, lattice distortion, and defect structure in determining collective physical behavior. The aim is to provide a physically grounded understanding of how heat extraction gradient and compositional modification govern phase stability, crystal structure selection, and magnetic and electronic properties of non-equilibrium high-entropy alloys.

Anotácia (SK):

Dizertačná práca je zameraná na fyzikálne mechanizmy formovania štruktúry viacprvkových kovových systémov v podmienkach výraznej termodynamickej nerovnováhy. Študované budú vysokoentropické a strednoentropické zliatiny na báze Fe–Co–Ni–Al–Mn v ekviatomických aj semiekiatomických kompozíciách, modifikované substitúciou prvkov V, Cr a Cu. Materiály budú pripravované tromi technikami rýchleho ochladzovania s rozdielnym gradientom odvodu tepla, čo umožní riadiť kinetiku tuhnutia, potlačenie difúzie a mieru chemickej neusporiadanosti.

Výskum sa zameria na vzťah medzi podmienkami tuhnutia, fázovou konštitúciou a mikroštruktúrou (tuhé roztoky typu FCC, BCC a usporiadané B2 štruktúry, lokálna krátkodosahová chemická usporiadanosť a nano-segregácie) a ich vplyvom na magnetické a elektrické transportné vlastnosti. Osobitná pozornosť bude venovaná úlohe chemickej komplexity, mriežkového skreslenia a defektovej štruktúry pri formovaní kolektívneho fyzikálneho správania. Cieľom práce je fyzikálne podložené pochopenie toho, ako gradient odvodu tepla a kompozičná modifikácia určujú stabilitu fáz, výber kryštálovej štruktúry a výsledné magnetické a elektrické vlastnosti nerovnovážne pripravených vysokoentropických zliatin.