

# Počítačové modelování a experimentální analýzy kovových materiálů

včetně **zaměření pro UČITELSTVÍ**

## Výzkumná skupina modelování materiálů (fyzikální, materiálová a strukturní chemie)

Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta  
Masarykova univerzita, Brno

pracovna C12/222



# Kovové materiály



## Vlastnosti

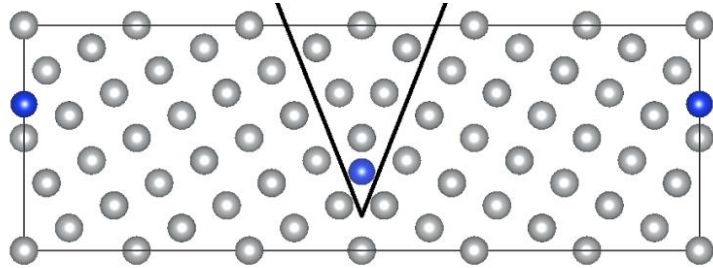
- stabilita struktury
- teplota tání (pájky)
- magnetismus (ukládání dat)
- pevnost, křehkost (automobily)
- korozivzdornost
- typ a pevnost vazeb



# Modelování

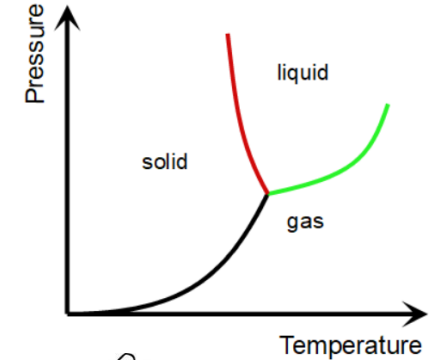
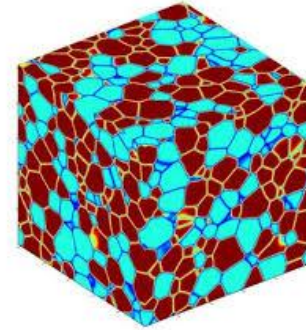
kvantově-mechanické

termodynamické



**Studium energií, magnetismu a mechanických vlastností a vlivu poruch krystalové mříže na ně**

- vychází z kvantové chemie (v programech už zapracována)
- určuje i experimentálně nedostupné údaje



**Předpovídá oblasti existence struktur v závislosti na teplotě a složení**

- založeno na termodynamice a experimentálních datech

# Experimentální práce

syntéza



úprava



složení

struktura

teplota transformací

fázový diagram



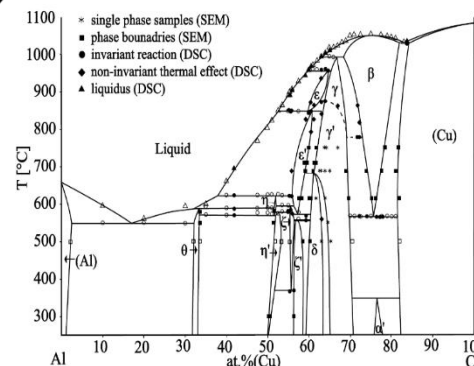
SEM



XRD



DSC



Spolupráce s AV ČR

Studované materiály

duraly, termoelektrika,  
uchovávání vodíku

Metody

**Elektronová mikroskopie**

Skenovací (SEM-EDX)

Transmisní (TEM)

**Prášková rentgenová difrakce (XRD)**

**Termická analýza (DSC, DTA)**

# Co můžete očekávat?

- Zvládnutí práce s PC, superpočítači, speciálními programy a přístroji
- Spolupráci s odborníky z MU a AV ČR

## Témata závěrečných prací

- vědecká – podíl na výzkumu
- výuková





# Co můžete očekávat?

## ODDĚLENÍ DIDAKTIKY

### Témata závěrečných prací

- **výuková**
  - výukové texty
  - návody k úlohám – výpočetní, laboratorní
  - příprava testů
  - pokusy pro střední školy
- IT a učitelství
  - webové stránky, sociální sítě, AI, ...



dr. Švandová



dr. Literák



doc. Pavlů



dr. Břížďala

**DĚKUJI ZA POZORNOST**

**Jana Pavlů**

**houserova@chemi.muni.cz**

**pracovna C12/222**