

TISKOVÁ ZPRÁVA

Praha, Brno 27. února 2025

Akademie věd ČR
Národní 1009/3, 110 00 Praha 1
www.avcr.cz

NA ENTROPII ZÁLEŽÍ! VÝZKUM ČESKÝCH VĚDCŮ POSOUVÁ VÝVOJ MATERIÁLŮ

Vědeckému týmu z Akademie věd ČR a Masarykovy univerzity se podařil zásadní přínos do výzkumu hromadění nečistot na rozhraní mezi krystaly. Tento jev například v 60. letech minulého století způsobil sérii havárií v jaderných elektrárnách ve Velké Británii. Studie publikovaná v prestižním časopise *Progress in Materials Science* otevírá nové možnosti pro vývoj odolnějších slitin či nových technologických procesů jejich výroby.

Katastrofální selhání ocelových turbín v jaderných elektrárnách je jedním z příkladů, kdy selhává soudržnost materiálu. Destrukce turbín v tomto případě nebyla následkem problémů vlastního provozu jaderné elektrárny, ale příčinou bylo hromadění (segregace) fosforu na rozhraních mezi krystaly kovu, tzv. hranicích zrn.

Segregaci nečistot zkoumají vědci na celém světě po desetiletí jak experimentálně, tak teoreticky a v poslední době i pomocí umělé inteligence. Přesto se experimentální výsledky a teoretická data málokdy shodují. Čeští vědci teď odhalili podstatu tohoto záhadného rozporu. Zásadní roli totiž hraje entropie, kterou dříve vědci v teoretických výpočtech často opomíjeli.

„Článek zahajuje novou etapu ve studiu segregace nečistot na hranicích zrn v materiálech. S kolegy jsme totiž prokázali, že bez zahrnutí entropie nelze naměřeným datům dobře porozumět a že na entropii opravdu záleží. Současně se mi podařilo předpovědět nový typ segregace příměsí na hranicích zrn, který je zcela řízen entropií,“ vysvětluje Pavel Lejček z Fyzikálního ústavu AV ČR.

Komplexní znalost chování materiálů, jako jsou oceli, včetně všech typů segregace příměsí na hranicích zrn může výrazně pomoci nejen k vývoji nových materiálů odolných vůči mezikrystalové křehkosti, ale i k vysokoteplotní stabilizaci vysoce perspektivních nanokrystalických materiálů pro konstrukční účely.

„Výzkum zahajuje jeden z důležitých trendů v této oblasti, přitom stojí zcela na výsledcích české vědy,“ zdůrazňuje Mojmír Šob z Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity.

Kontakt pro média: **Markéta Růžičková**
Divize vnějších vztahů AV ČR
press@avcr.cz
+420 777 970 812

Petra Köppl
Fyzikální ústav AV ČR
koppl@fzu.cz
+420 702 206 680

Entropie je termodynamická veličina, která charakterizuje míru neuspořádanosti materiálu. Liší se proto u strukturně uspořádaného krystalu a u méně strukturně uspořádaných oblastí, jako jsou hranice zrn v materiálu. Entropie je vedle energie důležitou charakteristikou segregace příměsí na hranicích zrn. Nelze ji tedy považovat jen za „matematický artefakt“, jak se často objevuje v odborné literatuře.

Více informací:

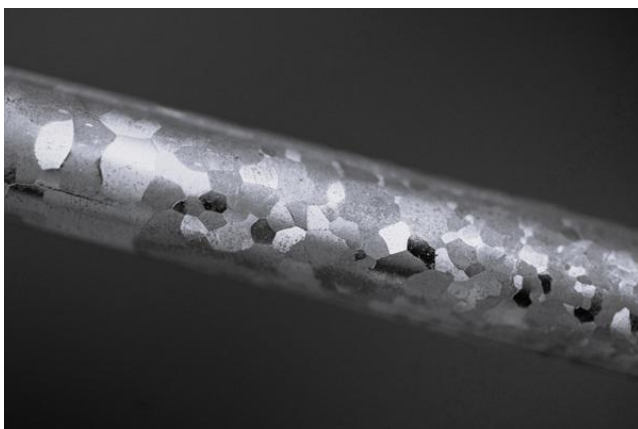
prof. **Pavel Lejček**
Fyzikální ústav AV ČR
+420 266 05 2167, +420 601 103 287
lejcekp@fzu.cz

prof. RNDr. **Mojmír Šob**, DrSc.
Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Ústav chemie
+420 549 49 7450
sob@chemi.muni.cz

Publikace:

Entropy: A controversy between experiment and calculations in grain boundary segregation, Pavel Lejček, Mojmír Šob, Progress in Materials Science Volume 151, May 2025, 101431
<https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2025.101431>

Fotogalerie



Ocelová tyč (průměr 11 mm) se zviditelněnými jednotlivými krystaly (zrny). Hranice mezi nimi vytvářejí spojitou síť procházející celou tyčí. V případě segregace příměsí jako fosfor na těchto hranicích dojde ke snížení jejich soudržnosti a při následném mechanickém namáhání pak k rychlému křehkému lomu.

FOTO: René Volfík, FZÚ AV ČR