

## **POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU**

(Należy podać cel projektu, opisać jakie badania realizowane będą w projekcie oraz podać powody podjęcia danej tematyki badawczej - maksymalnie jedna strona zdefiniowanego maszynopisu)

Celem niniejszego projektu są badania budowy atomowej oraz właściwości jednego z wielu znanych typów materiałów węglowych - węgla szklanego. Węgiel szklany posiada unikatową kombinację właściwości, co stanowi go dobrym surowcem w wielu zastosowaniach przemysłowych, np. do produkcji elektrod lub wysokotemperaturowych tygli, oraz medycznych – jest obecnie rozważany jako materiał do produkcji zastawek serca. Węgiel szklany jest twardy, posiada niską gęstość i wysoki stopień rozwinięcia powierzchni, jest nieprzepuszczalny dla gazów, odporny na działanie wysokiej temperatury, stabilny chemicznie, daje się łatwo polerować, a przede wszystkim jest biogodny i może być stosowany w implantach. Dlatego też, materiał ten jest niezwykle interesującym tematem badań.

Niestety, pochodzenie takich własności węgla szklanego, jak duża twardość, zamknięta porowatość i odporność na grafityzację nie zostało jeszcze wyjaśnione. Poza wpływem uwarunkowanym przez czynniki związane z produkcją, najważniejszym elementem, który wpływa na własności materiałów jest ich struktura w skali atomowej. Struktura węgla szklanego mimo kilkudziesięciu lat badań, nie została jednoznacznie określona i nadal trwa dyskusja nad znalezieniem poprawnego modelu budowy atomowej i mechanizmu powstawania porów w tym materiale, a także w innych formach węgla porowatych. Natomiast udało się ustalić, że obróbka temperaturowa w zakresie do 3000°C prowadzi do znacznych zmian w strukturze i właściwościach. Planowane jest zatem zbadanie serii próbek węgla szklanego wytworzonych poprzez pirolizę, czyli rozkład termiczny polimeru alkoholu furfurylowego w różnych temperaturach z zakresu 600 - 2700°C. Przeprowadzenie szczegółowej analizy zmian właściwości mechanicznych oraz porowatości następujących w procesie pirolizy ma na celu ustalenie ich związków ze strukturą. Finalnie, zamierzone jest zaproponowanie modelu struktury węgla szklanego, który tłumaczył będzie odporność na grafityzację oraz unikatowe własności tej formy węgla. Szczegółowe opisanie cech struktury węgla szklanego może pomóc w charakterystyce innych typów węgla porowatych. Badania biomateriałów węglowych są bardzo ważne, w celu doboru odpowiednich materiałów konstrukcyjnych dla implantów medycznych. Dużą nadzieją na bardziej wytrzymałe materiały do zastosowań medycznych mogą być kompozyty na bazie węgla szklanego.

Realizacja badań proponowanych w projekcie będzie przeprowadzona za pomocą zaawansowanych metod eksperymentalnych oraz symulacji komputerowych. Do wyznaczenia parametrów struktury atomowej zastosowana będzie tradycyjna metoda dyfrakcji promieni rentgenowskich i neutronów, ale analiza otrzymanych wyników rozpraszania zostanie wykonana w niekonwencjonalny sposób – za pomocą tzw. funkcji rozkładu par atomów. Funkcja ta jest narzędziem do określania rozmieszczenia atomów w materiałach, które cechują się brakiem idealnej struktury krystalicznej - przeciwnie niż ma to miejsce np. w graficie czy diamencie. Symulacje komputerowe posłużą do wygenerowania zbiorów atomów, na podstawie których obliczone zostaną teoretyczne dane dyfrakcyjne. Poszukiwane będą modele atomowe, które dobrze pasują do danych dyfrakcyjnych, a także tłumaczą pochodzenie takich właściwości węgla szklanego jak duża twardość oraz występowanie zamkniętych porów. Pomiar twardości wykonane zostaną techniką nanoindentacji, czyli wykorzystując wglębnik o promieniu ostrza rzędu miliardowych części metra. Własności porów w strukturze badanych węgla będą określone na podstawie analizy rozpraszania promieni rentgenowskich pod małymi kątami.