

Przewodnictwo cieplne materiałów ceramicznych zależy od dwóch głównych czynników: typu zastosowanego związku ceramicznego (składowa materiałowa) oraz mikrostruktury gotowego wyrobu (składowa technologiczna). Rozpatrując składową materiałową można przyjąć, że transport ciepła w fazie stałej związany jest głównie z ukierunkowanym ruchem gazu fononowego, który jest odpowiedzialny za przenoszenie energii (ciepła). Z kolei oporność cieplna (zdolność izolacyjna) określa wielkość oporu, jaki stawiają elementy struktury materiału wobec rozchodzących się w nim fal cieplnych. Przyczyną oporu cieplnego jest rozpraszanie fal cieplnych w wyniku aharmonicznych drgań atomów w kryształach. Inną przyczyną oporu cieplnego są **defekty struktury krystalicznej**, które stanowią naturalną przeszkodę dla rozprzestrzeniania się fal cieplnych. Do defektów tych zalicza się przede wszystkim defekty liniowe, a także defekty punktowe, w szczególności **obce atomy** w kryształach powodujące efekt zaburzenia periodyczności drgań atomów. Skala tego efektu związana jest z różnicą mas (**fluktuacje masy**), wielkością atomów i różnicą w energii wiązań międzyatomowych (**fluktuacje pola odkształceń**). Średnia droga swobodna fononów może również ulec zmniejszeniu w wyniku rozpraszania fononów na granicach ziaren w tym na **granicach międzyfazowych**, przy czym ma to istotne znaczenie w przypadku materiałów o charakterze **submikrokrystalicznym**. Wszystkie te czynniki powodują skrócenie średniej drogi swobodnej fononów, odpowiedzialnej za efekt przewodnictwa cieplnego.

Wykorzystując te założenia zaproponowano wytworzenie nowej grupy materiałów, łączących w sobie różne elementy zapewniające obniżenie przewodnictwa cieplnego (skrócenie średniej drogi swobodnej fononów), a konkretnie związanych z: uzyskaniem struktury submikrokrystalicznej, zdefektowaniem struktury krystalicznej roztworów stałych oraz wytworzeniem granic międzyfazowych.

Zakres prowadzonych w projekcie badań łączy w sobie wiedzę z typowego obszaru inżynierii materiałowej oraz podstawowych mechanizmów przewodnictwa cieplnego i jonowego. Proponuje się wykorzystanie podstawowej wiedzy z zakresu fizyki, dotyczącej wpływu zdefektowania sieci roztworów stałych na skrócenie średniej drogi swobodnej fononów, a przez to na rozpraszanie fal fononowych i obniżenie przewodnictwa cieplnego (z równoczesnym zwiększeniem przewodnictwa jonowego). Wykonane zostaną badania przewodnictwa cieplnego i jonowego związane z:

- wprowadzeniem defektów sieciowych do roztworu stałego - $Zr(Hf,Ce)O_2$,
- efektem fluktuacji masy i pola odkształceń (wprowadzenie tlenków pierwiastków ziem rzadkich),
- wygenerowaniem struktury submikrokrystalicznej o dużej gęstości granic ziarn;
- wygenerowaniem struktury wielofazowej.

Cel naukowy projektu obejmuje: - ocenę możliwości wytworzenia materiałów jednofazowych o strukturze roztworów stałych, a także materiałów wielofazowych o charakterze równowagowym, - ocenę wpływu submikrokrystalicznej morfologii otrzymanych materiałów, a także roli dodatków w postaci tlenków CeO_2 , HfO_2 , tlenków pierwiastków metali ziem rzadkich RE_2O_3 oraz ocenę wpływu struktury wielofazowej, - ocenę zachowania stabilności składu fazowego w warunkach długotrwałego i wysokotemperaturowego wygrzewania, a także kompatybilność cieplno – chemiczną w kontakcie z innymi fazami, - charakterystykę wybranych właściwości elektrycznych i cieplnych.

Efekt zwiększenia właściwości izolacyjnych uzyskany zostanie poprzez wprowadzenie do sieci roztworu stałego tetragonalnego tlenku ZrO_2 dodatków w postaci innych tlenków typu HfO_2 i CeO_2 o podobnym typie sieci, a także tlenków pierwiastków ziem rzadkich typu RE_2O_3 . Drugą grupę opracowywanych związków ceramicznych stanowić będą materiały wielofazowe o charakterze równowagowym z dodatkiem tlenku Al_2O_3 . W tym przypadku dodatkowym czynnikiem wpływającym na obniżenie przewodnictwa cieplnego będzie wygenerowanie równowagowych granic międzyfazowych.

We wszystkich przypadkach do wytworzenia materiałów wynikowych zastosowane zostaną materiały wyjściowe o strukturze submikrokrystalicznej, co ma zapewnić poprawę właściwości izolacyjnych w wyniku wygenerowania dużej liczby granic ziarn.

Efekt prowadzonych w projekcie badań będzie opracowanie charakterystyk materiałowych obejmujących wybrane właściwości cieplne i elektryczne nowych materiałów ceramicznych. Ponadto badania te pozwolą na ocenę wpływu struktury submikrokrystalicznej, dodatków tlenków różnego typu i składu fazowego na obniżenie przewodnictwa cieplnego i właściwości elektrycznych nowych izolacyjnych materiałów ceramicznych. Dokonana zostanie również ocena stabilności składu fazowego i kompatybilności cieplno-chemicznej tych materiałów, co decydować będzie o ich trwałości. Równocześnie określona zostanie stabilność własności cieplnych i elektrycznych w funkcji czasu i temperatury.

Uzyskane wyniki znacznie poszerzą wiedzę o możliwościach otrzymywania i własnościach nowych jedno- i wielofazowych materiałów izolacyjnych z zachowaniem struktury submikrokrystalicznej materiałów wyjściowych. Niezwykle istotne jest również połączenie metod badań eksperymentalnych z symulacjami numerycznymi charakteryzującymi zdolności izolacyjne otrzymanych materiałów, pozwoli to na takie zaplanowanie eksperymentów, aby dostarczyły jak największej ilości informacji z poznawczego punktu widzenia.