

Przedmiotem badań będą szkła fosforanowe zawierające jony żelaza i/lub glinu oraz materiały szkło-ceramiczne będące wynikiem ich krystalizacji. Szkła fosforanowe są materiałami o dużym znaczeniu technologicznym i aplikacyjnym. Charakteryzują się relatywnie niską temperaturą topnienia, stosunkowo wysokim współczynnikiem rozszerzalności termicznej oraz wyższym przewodnictwem elektrycznym w stosunku do konwencjonalnych szkieł krzemianowych. Ich wysoki współczynnik rozszerzalności termicznej przy jednocześnie niskiej temperaturze likwidusu powoduje, że stają się atrakcyjnym materiałem jako luty szklane do połączeń metal - ceramika. Z drugiej strony szkła fosforanowe z dodatkiem Ca wykazują biokompatybilność i mogą służyć jako implanty dentystyczne lub kostne. Dodatek ziem rzadkich czyni je potencjalnymi materiałami do zastosowań optoelektronicznych oraz laserowych. Ze względu na występowanie łatwo hydratyzujących wiązań P-O-P stosuje się je jako nośniki mikroelementów w nowoczesnych nawozach o kontrolowanej rozpuszczalności. Z drugiej jednak strony szkła fosforanowe cechują się raczej niską odpornością na działanie czynników środowiskowych np. pary wodnej. Niemniej jednak, częściowe zastępowanie fosforu przez żelazo lub/i glin prowadzi do znacznego wzrostu odporności na działanie wody tychże szkieł. Wzrost ten jest niezwykle szybki i szkło o zawartości ok. 40 % molowych Fe_2O_3 charakteryzuje się bardzo wysoką odpornością chemiczną. Jest ono obecnie rozważane jako materiał do wiązania, w swej strukturze, szczególnie niebezpiecznych form odpadów radioaktywnych zawierających znaczne ilości chlorków i siarczanów, które nie mogą być wiązane przez cementowanie lub witrafikację w szklach borokrzemianowych.

Badania jakie planujemy prowadzić w ramach projektu to analiza oddziaływań pomiędzy poszczególnymi jonami w ciele stałym. Prowadzi ona do konkretnego uporządkowania więźby szkła. Nadaje to szkłu specyficznych cech. Zatem jako cel projektu postawiono określenie budowy więźby szkieł fosforanowych z układu $P_2O_5-Fe_2O_3-Al_2O_3$ na drodze badań eksperymentalnych oraz modelowania molekularnego metodami klasycznej i kwantowej dynamiki molekularnej.

W proponowanych szklach jony żelaza jak i glinu mogą spełniać dwojaką rolę w zależności od przyjmowanej liczby koordynacyjnej w stosunku do tlenu. Jony te mogą z jednej strony budować więźbę szkła, a z drugiej być jej modyfikatorami. Obecnie stosowane metody badawcze nie zawsze dają jednoznaczną odpowiedź na to pytanie. Powoduje to, że istnieje cały szereg różnego rodzaju modeli więźby tych szkieł. W projekcie przewiduje się zaproponowanie modelu struktury szkieł fosforanowych zawierających jony żelaza i/lub glinu na drodze szczegółowych badań eksperymentalnych w połączeniu z modelowaniem molekularnym. Planuje się przeprowadzenie szczegółowych badań właściwości termicznych szkieł z układu $P_2O_5-Fe_2O_3-Al_2O_3$. Na tej podstawie wyznaczone zostaną warunki ich krystalizacji. W wyniku prowadzonego procesu krystalizacji otrzymany zostanie dewitryfikant. Otrzymane szkła oraz ich dewitryfikaty poddane zostaną badaniom strukturalnym z zastosowaniem spektroskopii FTIR, Ramana, Mössbauera, MAS-NMR oraz XRD. Określone zostaną również ich właściwości mechaniczne metodą nanoindentacji. Równocześnie z badaniami eksperymentalnymi prowadzone będą symulacje teoretyczne. W pierwszej kolejności przewiduje się przeprowadzenie symulacji drogą klasycznej dynamiki molekularnej. W tym celu, na podstawie przeprowadzonych wcześniej badań nad krystalizacją szkieł, danych dotyczących gęstości, właściwości mechanicznych, jak również na podstawie danych literaturowych, dobrana zostanie forma i parametry potencjału oddziaływań pomiędzy poszczególnymi jonami oraz warunki prowadzenia symulacji. W efekcie przeprowadzonych symulacji określona zostanie wstępnie struktura więźby proponowanych szkieł. Przeprowadzone symulacje metodami klasycznymi posłużą jako punkt wyjścia do wykonania symulacji kwantowej dynamiki molekularnej metodą Carl-Parrinello. W efekcie powinno to doprowadzić do bardzo realistycznego przewidywania właściwości nowych szkieł na podstawie prowadzonych symulacji komputerowych jak również wpływu na nie innych dodatków. Jednoczesne połączenie metod eksperymentalnych z teoretycznymi w zastosowaniu do materiałów amorficznych nadaje projektowi nowatorski charakter.