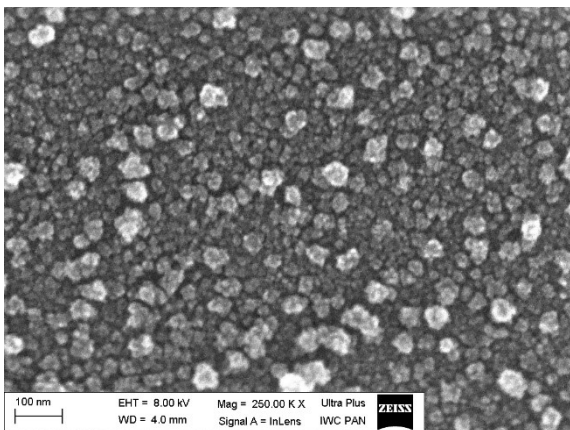


Dzisiejsza technologia wymaga nowych materiałów „szytych na miarę” (ang. *tailored-on-demand*), które powinny być zoptymalizowane pod kątem najlepszych wyników w danych zastosowaniach. Od dawna wiadomo, że właściwości tych materiałów zależą nie tylko od ich składu chemicznego i fazowego, ale także od ich mikrostruktury, zwłaszcza w skali nano. Jedną ze strategii wytwarzania nowych materiałów do zastosowań praktycznych jest stabilizacja ich wysokotemperaturowych faz o dobrych właściwościach (np. silnie przewodzących) do temperatury pokojowej, przy użyciu różnych procesów syntezy. Są to przypadki α -AgI (doskonały przewodnik jonowy Ag^+ , stabilny powyżej 147°C) i δ - Bi_2O_3 (doskonały przewodnik jonowy O^{2-} , stabilny w zakresie temperatur 730 - 825°C). W obu przypadkach możliwe jest ustabilizowanie tych faz do temperatury pokojowej w postaci nanometrycznych krystalitów uwięzionych w odpowiednich szklistych matrycach. Niestety, mechanizmy takiej stabilizacji nie zostały jeszcze wiarygodnie i ostatecznie zbadane ani ustalone. Można znaleźć tylko częściowe opracowania na temat szczególnych przypadków tych zjawisk.

W tym projekcie planujemy wypełnić tę fundamentalną lukę poprzez szczegółowe zbadanie mechanizmów stabilizacji δ - Bi_2O_3 do temperatury pokojowej. Czujemy się do tego zobowiązani, ponieważ eksperymentalnie odkryliśmy ten efekt stabilizacji podczas naszych badań termicznej nanokrystalizacji szkieł bizmutanowych [1]. Będzie to więc naturalna kontynuacja naszej dotychczasowej pracy. Planujemy ustalić mechanizm stabilizacji δ - Bi_2O_3 dzięki realizacji szerokiego programu uzupełniających się badań eksperymentalnych i modelowania komputerowego. Część eksperymentalna obejmie syntezę i wiele metod pomiarowych, które powinny dostarczyć pełnej informacji o strukturze, składzie fazowym, porządku lokalnym, właściwościach termicznych, mikrostrukturze w skali dziesiątek nanometrów i poniżej, transporcie elektrycznym, strukturze międzyfazowej i lokalnej dynamice. Część obliczeń numerycznych będzie koncentrować się na znalezieniu warunków stabilności nanoklastrów i nanokrystalitów δ - Bi_2O_3 osadzonych w fazie szklistej. Badania będziemy realizować we współpracy z wiodącymi ośrodkami akademickimi i badawczymi w Polsce, Europie (Niemcy, Francja) i USA. Metody eksperymentalne obejmą zależną od temperatury dyfrakcję rentgenowską (XRD-T), różnicową analizę termiczną (DTA), różnicową kalorymetrię skaningową (DSC), spektroskopię absorpcyjną promieniowania rentgenowskiego XANES / EXAFS, z użyciem promieniowania synchrotronowego, spektroskopię magnetycznego rezonansu jądrowego (MAS NMR), skaningową i transmisyjną mikroskopię o wysokiej rozdzielczości (SEM i HR-TEM) oraz spektroskopię impedancyjną (IS). W modelowaniu numerycznym wykorzystywane będą metody dynamiki molekularnej (MD) i/lub teorii funkcjonału gęstości (DFT).

Jesteśmy przekonani, że ambitny program tych badań pozwoli nam przedstawić kompletny, rzetelny i dobrze udokumentowany mechanizm stabilizacji nanokrystalitów fazy wysokotemperaturowej (tutaj δ - Bi_2O_3) do temperatury pokojowej. Jesteśmy również przekonani, że wnioski z badań zrealizowanych w ramach tego projektu, będą cenne także w badaniach stabilizacji innych faz wysokotemperaturowych do temperatury pokojowej.



Rys. 1. Nanokrystality fazy δ - Bi_2O_3 ustabilizowanej do temperatury pokojowej, dzięki ich uwięzieniu w matrycy szklistej [1].

Bibliografia

- [1] T. K. Pietrzak, J. E. Garbarczyk, and M. Wasiucionek, “Stabilization of superionic δ - Bi_2O_3 phase at room temperature by thermal nanocrystallization of bismuth oxide glasses,” *Solid State Ionics*, vol. 323, pp. 78–84, 2018, <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2018.05.021>.