

Projekt o tytule „Określenie struktury lokalnej węgliku boru ($B_{13}C_2$) przy użyciu metody Pair Distribution Function” ma na celu zastosowanie nowatorskich metod badań krystalograficznych lokalnej struktury węgliku boru. Metoda Pair Distribution Function (PDF) pozwala przy pomocy pomiarów dyfrakcji proszkowej (rentgenowskich bądź neutronów) opisać odległości międzyatomowe (m.in. w materiałach krystalicznych). Ta metoda, pozwalająca na określenie lokalnej struktury materiałów) wykorzystywana jest przede wszystkim w układach nieuporządkowanych. Właśnie takim materiałem jest węglik boru $B_{13}C_2$, którego właściwości mechaniczne są szeroko opisywane i pożądane w dzisiejszej technologii i przemyśle. $B_{13}C_2$ odznacza się bardzo wysoką twardością (porównywalną do diamentu), stabilnością termiczną oraz odpornością chemiczną. Dodatkowo, prowadzone są badania nad wykorzystaniem tego materiału jako materiału nadprzewodzącego czy też detektora neutronów (z racji na zawartość boru). Jednak już samo dokładne opisanie struktury tego związku jest bardzo trudne, a to ze względu na podobieństwa izotopów ^{11}B i ^{12}C , co utrudnia rozróżnienie tych dwóch atomów za pomocą większości standardowo wykorzystywanych technik. Trudności z określeniem dokładnych pozycji atomów są dużym problemem, a to z kolei spowodowane jest istotnym stopniem nieporządku i defektów strukturalnych. Występowanie tych defektów i nieporządku jest silnie skorelowane z właściwościami mechanicznymi materiału. Dostępne publikacje pokazują, że teoretyczne symulacje DFT (Density Functional Theory) określają analizowany węglik boru jako materiał metaliczny, jednak pomiary rzeczywiste wskazują na to, że jest półprzewodnikiem. Te różnice wynikają z nieuporządkowania występującego w strukturze. Z tego powodu, w moim projekcie, planuję określić lokalną strukturę $B_{13}C_2$, poprzez:

- syntezę tego związku metodą SHS (Self-propagating High-temperature Synthesis) w różnych temperaturach, w celu określenia wpływu temperatury syntezy na zdefektowanie struktury,
- pomiary synchrotronowe prowadzone na specjalistycznych liniach eksperymentalnych przystosowanych do pomiarów PDF,
- analizę danych i zastosowanie metody Pair Distribution Function (PDF),
- zastosowanie Odwrotnej Metody Monte Carlo (Reverse Monte Carlo method) w celu określenia lokalnej struktury i stopnia jej nieuporządkowania.

Warto podkreślić, że jest to nowatorskie podejście do rozwiązania problemu opisu struktury tego związku, która nie była wcześniej wykorzystywana. Jednak przeprowadzone przeze mnie symulacje pokazują, że mimo podobieństwa atomów boru i węgla można je od siebie rozróżnić i określić ich położenie.

Wynikiem realizacji projektu będzie opis lokalnej struktury materiału, określenie stopnia nieporządku oraz określenie jak temperatura syntezy wpływa na strukturę krystaliczną $B_{13}C_2$.