

Mikrostruktura uhlíkových nanomateriálů studovaná metodami rtg. rozptylu

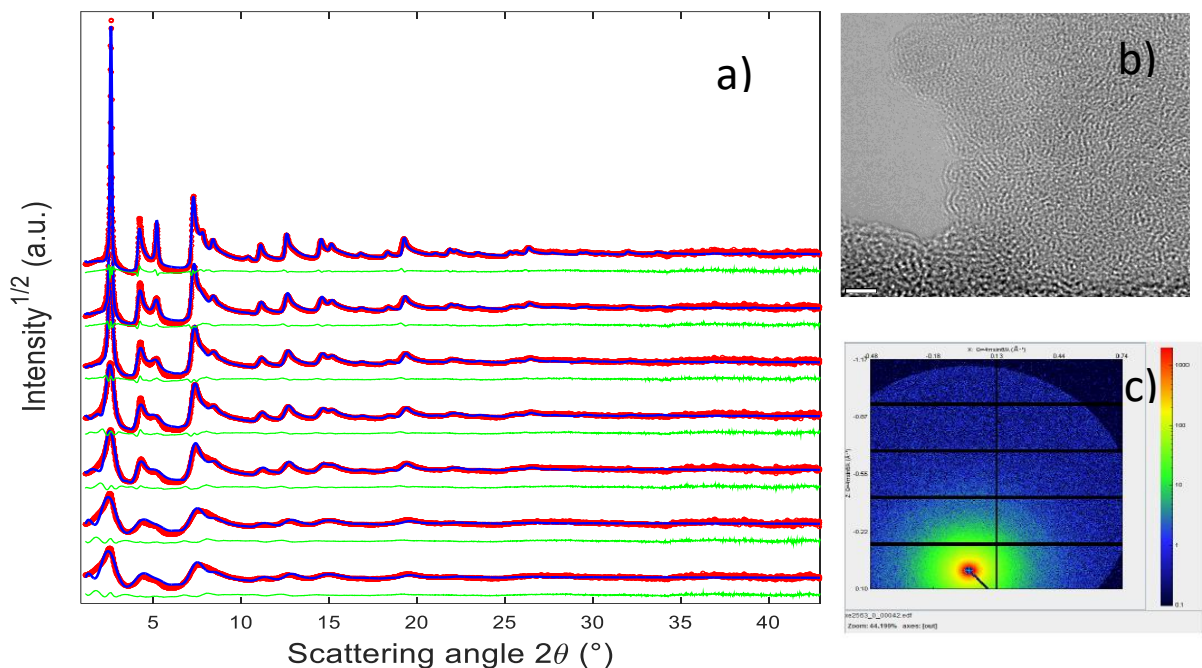
Školitel: RNDr. Milan Dopita, Ph.D. (dopita@gmail.com)

Katedra fyziky kondenzovaných látek

Abstrakt:

Materiály na bázi nanokrystalického vysoce porušeného uhlíku (turbostratický uhlík – carbon black) jsou využívány v celé řadě průmyslových aplikací, jako jsou refraktorní materiály, v chemii povrchů jako katalyzátory, či nosiče katalyzátorů, různé typy filtrů, jako akumulční média pro skladování zemního plynu a vodíku, jako části mikroelektronických výrobků, jako anodové materiály interkalované Li-ionty v Li-iontových bateriích.

Jejich mikrostrukturní popis je značně ztížen množstvím strukturních defektů krystalové mřížky jako fluktuacemi v mezivrstevné vzdálenosti jednotlivých grafitických vrstev, náhodnými laterálními translacemi těchto vrstev, jejich zvrásněním, vzájemnou náhodnou disorientací okolo normály k těmto vrstvám, atd.



Obrázek 1. Série měřených a spočtených difrakčních záznamů vzorku nanokrystalického turbostratického uhlíku žíhaného při různých teplotách (a), HR/TEM obrázek nanokrystalického turbostratického uhlíku (b), změřený malouhlový rozptyl rtg. záření na vzorku nanokrystalického turbostratického uhlíku (c).

Náplní práce bude experimentální studium reálné struktury vybraných turbostratických uhlíkatých nanomateriálů. Vytvoření mikrostrukturních modelů různě deformovaných nanokrystalických, silně porušených, uhlíkatých materiálu. Simulace rozptylu rentgenového záření (rtg. rozptyl) na těchto strukturách. Rtg. měření těchto materiálu, fitování naměřených dat.

Korelace mikrostrukturních parametrů získaných z rtg. měření s dalšími vlastnostmi studovaných vzorků, jejich hustotou, porozitou, kontaminací cizími atomy (vodíkem, kyslíkem, kovy) a kyslíkatými skupinami.

Tento studentský projekt je součástí výzkumných úkolů řešených v rámci projektu "Centrum nanomateriálů pro pokročilé aplikace, projektu číslo CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000485", financovaného z operačního programu výzkum, vývoj a vzdělávání (OP VVV).

Zásady pro vypracování

1. Studium doporučené odborné literatury, literaturní rešerže.
2. Simulace rtg. rozptylu na nanokrystalických uhlíkatých materiálech.
3. Rentgenografická měření vzorků. Maloúhlový rozptyl rtg. záření (SAXS), rentgenografická difrakční měření.
4. Fitování měřených dat, určení mikrostrukturních parametrů vzorků z rtg. měření.
5. Korelace mikrostrukturních parametrů určených z rtg. měření s výsledky získanými pomocí dalších komplementárních metod.
6. Vytvoření fyzikálních modelů mikrostruktury studovaných materiálů.

Literatura:

1. S. Ravi, P. Silva (eds.), Properties of Amorphous Carbon, INSPEC, London, UK, 2003.
2. M. Dopita et al., Adv Eng Mater 15, 2013, 1280.
3. M. Dopita et al., Carbon 81, 2015, 272.
4. Aktuální články z odborných periodik.