

Nr projektu: 2022/06/X/ST3/01743

Tytuł: Pomiar i obliczenia DFT potencjałów międzyatomowych dla rozwoju reaktywnego pola siły wiązania w celu zbadania mechanizmu powstawania fotokatalizatora CuFe₂O₄-Cu₂O podczas naświetlania zawiesiny laserem impulsowym.

Opis projektu:

Impulsowe topienie laserowe zawiesiny nanocząstek w cieczach (LML) w ostatnim czasie przyciągnęło uwagę badaczy ze względu na jego zastosowanie w syntezie heterostruktur, kompozytów, sferycznych cząstek submikronowych czy nanostruktur monokryształów. Jest to jednoetapowy proces, który nie wymaga żadnego przetwarzania końcowego i/lub innych technik do zakończenia procesu syntezy. Pomimo coraz szerszego stosowania metody, nadal wiele pytań dotyczących mechanizmów i procesów pozostaje nie wyjaśnione, co utrudnia kontrolę wytwarzania cząstek metodą impulsowego naświetlania laserowego. **Celem tego projektu jest wykorzystanie analizy eksperymentalnej i teorii funkcjonału gęstości (DFT) do wygenerowania pola sił reaktywnych wiązań (RBFF) mających zastosowanie w dynamice molekularnej (MD), co umożliwi zrozumienie mechanizmu powstawania cząstek podczas procesu LML, a w dalszej perspektywie kontrolę procesów tworzenia cząstek techniką impulsowego topienia laserowego.** Studium przypadku dotyczyć będzie laserowego naświetlania zawiesiny nanoproszków miedzi (Cu) i magnetytu (Fe₃O₄) w etanolu prowadzącego do formowania układów CuFe₂O₄-Cu₂O.

Plan badawczy został podzielony na 4 pakiety robocze (WP):

WP1. Studium wykonalności i znalezienie najlepszej metody eksperymentalnej do badania potencjału międzyatomowego podczas oddziaływania lasera z materią w zawiesinie.

WP2. Pomiar potencjału międzyatomowego wybraną metodą zaproponowaną w WP1.

WP3. Dopasowanie potencjału międzyatomowego za pomocą odpowiedniego modelu .

WP4. Porównanie potencjałów międzyatomowych zaproponowanych metodą eksperymentalną i metodą DFT.