

Streszczenie rozprawy doktorskiej

W niniejszej rozprawie doktorskiej uzyskano nowe materiały hybrydowe na zróżnicowanych strukturalnie i chemicznie powierzchniach materiałów węglowych przez ich funkcjonalizację małymi cząsteczkami organicznymi na bazie tiofenu i jego pochodnych lub pojedynczymi heteroatomami. W badaniach wykorzystano materiały węglowe takie jak: nanorurki węglowe, grafen, płatki grafenowe, węgiel aktywny typu Norit czy węgiel aktywny pochodzenia naturalnego otrzymany z drzewa egipskiego (*Delonixregia*, *Leucaenaleucocephala*, *Salixmucronata* oraz *Tipuanatipu*). Nowością jest zaproponowanie metody syntezy 3D grafenu, który jest otrzymywany na drodze mokrej eksfoliacji z komercyjnego grafitu z wykorzystaniem twardych templatów jak CaCO_3 oraz Na_2CO_3 . Dodatek templaty przyczynił się do utrwalenia trójwymiarowej struktury grafenowej i wzrostu pola powierzchni materiału z $25 \text{ m}^2/\text{g}$ (komercyjny grafit) do $333 \text{ m}^2/\text{g}$ (3D grafen). Opracowano również innowacyjną metodę radiacyjną wprowadzania heteroatomów do podłoży węglowych. Eksperymentalnie potwierdzono skuteczność metody dla insercji azotu nawet do ok. 4% wag. w warunkach naświetlania promieniami gamma przy dawce promieniowania mniejszej niż 30 kGy. Metoda napromieniania jest bardzo selektywna ze względu na postać chemiczną wstawionych atomów N, które są związane wyłącznie jako grupy czwartorzędowe, czyli grupy funkcyjne wyjątkowo przydatne do ulepszania takich domieszkowanych elektrod grafenowych w bateriach i superkondensatorach. Metodę można rozszerzyć do chemicznego wprowadzania innych heteroatomów, zwłaszcza takich jak siarka, bor lub fosfor.

Uzyskane materiały w pełni scharakteryzowano wykonując takie analizy jak: analizę elementarną, obrazowanie SEM, HRTEM, XRD, XPS, spektroskopię Ramana oraz niskotemperaturową adsorpcję azotu za pomocą metody BET. Mikroskopia konfokalna potwierdziła immobilizację oligomerów na powierzchni badanych węgli. Oceniono wpływ wprowadzenia cząsteczki barwnika zarówno na właściwości samego barwnika, jak i skumulowane właściwości materiału hybrydowego oligotiofen – nośnik węglowy.

Wsparcie badań eksperymentalnych metodami obliczeniowymi pozwoliło na odpowiednią kalibrację stosowanych metod. Dodatkowo obliczenia pozwalają przewidzieć stabilność takich układów, gdzie energia interakcji jest stosunkowo wysoka i bardziej ujemna od T do 6T. Potencjał adsorpcji wewnątrz CNT jest zawsze większy niż na zewnątrz, ale w przypadku adsorpcji T, 3T oraz 6T zachodzi mieszane wiązanie na powierzchniach zewnętrzno-wewnętrznych. Metoda enkapsulacji związków organicznych nie prowadzi do wielu zmian strukturalnych, przy zachowaniu pożądaných właściwości materiału węglowego.

Wybrane metody dostarczają komplementarnych wyników pozwalających na poznanie właściwości modyfikowanych materiałów, ale także na opracowanie wytycznych do dalszej pracy badawczej.

Przedstawione badania to duży krok w kierunku wykorzystania gotowych i zmodyfikowanych materiałów komercyjnych oraz otrzymanych autorskimi metodami węgla jako atrakcyjnych, niedrogich powierzchni bazowych dla barwników.