

Институт по обща и неорганична химия
Българска академия на науките

информационен бюлетин

брой 49

17 февруари 2009 г.

В резултат на два успешни проекта от конкурсната сесия на ФНИ за създаване на Центрове за върхови научни постижения, в края на 2008 г. бе сключен договор за създаване на



Национален център за нови материали UNION

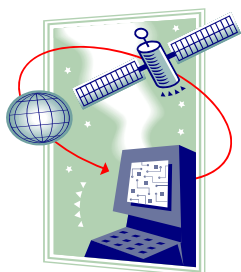
Основна задача на Центъра ще бъде повишаване на нивото на научните изследвания в областта на новите материали в институциите от консорциума и в цялата страната. Новият център ще бъде официално открит на 21 февруари 2009 г. Базова организация е Институтът по обща и неорганична химия към БАН, а координатор – ст.н.с. I ст. дхн К. Хаджииванов. Центърът ще се състои от два модула:

Модул 1 (Център за съвременни материали) обединява изследователски екипи от две научни институции – ИОНХ – БАН (базова организация) и Химически факултет на СУ „Св. Климент Охридски“. Двете институции са равноправни партньори в консорциума.

Модул 2 (Нови материали за медицината и фармацевцията) включва изследователи от Института по полимери на БАН (базова организация) и от Фармацевтичния и Медицинския факултети на Медицинския Университет - София. Координатор на модула е ст.н.с. I ст. дхн К. Троев.

Модул 1: Национален център за съвременни материали

Научни задачи



Усилията ще бъдат концентрирани върху разработване на научни тематики, в които членовете на консорциума имат традиционни успехи, и са важни за развитие на индустрията. При създаване на Центъра ще стартира и изучаването на нов клас високоперспективни нови материали и ще се въведат нови съвременни методи на изследване, което ще обогати научната тематика на Центъра, ще доведе до усвояване на нови съвременни методи и ще допринесе за мултидисциплинарния подход при дизайна на нови материали.

Предвидените за изследване материали могат да се категоризират в четири групи според областите на тяхното приложение:

Материали за получаване на чиста енергия

В проекта се предвижда разработването на три класа материали за получаване и съхранение на чиста енергия: материали за акумулиране и съхранение на водород, нанокompозитни материали за електроди в литиево-йонни батерии и материали за твърдотелни горивни елементи.

Материали за оптиката и за молекулната електроника

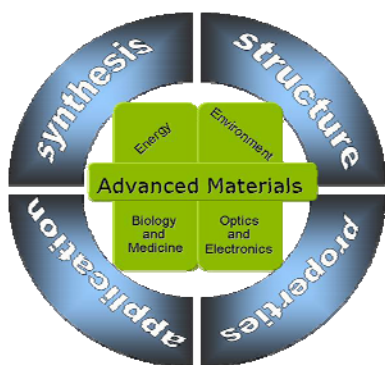
Ще се изследват нови активни среди на базата на молибдати и волфрамати с широк спектър на излъчване в близката инфрачервена област. Ще бъдат синтезирани нови нелинейно оптични материали с висок коефициент на преобразуване в близката и далечната ултравиолетова област. Предвидено е създаването на хибридни материали по зол-гелни технологии за соларни клетки, оптични филтри, УВ – сензори, лазерни материали, оптичен запис на информация и органични светодиоди.

Ще се синтезират и изследват едномерни спрегнати полимери и нанотръби, двумерни самоорганизиращи се слоеве и тримерни стабилни крайни и периодични структури. Търсените свойства ще бъдат проводимост, магнетизъм, нелинейни свойства, склонност към самоорганизация. Предвижда се разработване на нови синтетични подходи и изучаване механизма на транспорт на заряди. Ще бъдат използвани разнообразни теоретични, инструментални и синтетични методи.

Биологично-активни материали с приложение в медицината

Предвижда се разработването на два класа материали: материали с биомедицинско приложение и материали за медицинска козметика - костни имплантанти на базата на нови микрофибрилно-усилени полимерни композити, както и на модифицирани калциево-фосфатни материали; полимерни матрици за тъканно инженерство; белтъчни нано- и микросфери за контролирано локално лечение на хронични рани. Материалите за медицинската козметика включват минерални композити с биологична активност с приложение в козметични, фармацевтични и лекарствени продукти и технологии за тяхното производство; миещи средства – ПАВ, пени и антипенители.

Предвиждат се компютърен молекулен дизайн и насочен синтез на нови хетероциклически съединения с предварително зададена структура, която отговаря на определени очаквани свойства. В резултат се очаква да се въведат фармакофорни заместители обуславящи биологична активност, като антибактериална, антимикотична, АСЕ инхибиторна, антихистаминова, растеж-регулираща при растения и др.



Материали за опазване на околната среда

От основно значение за повишаване на качеството на живота е опазването на околната среда. В това направление обект на изследванията ще бъдат материали, свързани с контрола и почистването на околната среда.

Материалите ще бъдат охарактеризирани с помощта на химични и физични методи, както и чрез компютърно моделиране на тяхната структура и свойства. Ще бъде проучена възможността за внедряване на материалите за контрол и почистване на околната среда, както и за оползотворяване на промишлени отпадъци.

Материали на бъдещето

Усилията на Центъра ще бъдат разпределени в две насоки. Първата насока включва използването на нов подход за анализ на научно-изследователските приоритети в областта на материалите на бъдещето, с цел да се дефинират и очертаят стратегическите области с най-голям потенциален принос към икономическото развитие на България. В тази връзка Центърът ще си сътрудничи с инициативата Foresight България и ще провежда системни анкети за проучване на текущите и бъдещите нужди на икономиката. Стартирането на тази инициатива се очаква, от една страна, да предложи алтернативи за развитие на научно-изследователската дейност на Центъра в бъдеще, а от друга страна – резултатите може да се използват от МОН и други правителствени и неправителствени организации при разработване на политики и стратегии в областта на материалите с технологично значение.

Материали на бъдещето

Втората насока е да се въведат тематично нови за UNION материали и методи на изследване. Дейността ще бъде насочена към получаването на нов клас от материали на основата на метал-органични структури (MOFs - Metal Organic Frameworks - хибридни микропорести метал-органични съединения, съдържащи специфични отворени канали и/или пори (по-малки от 2 nm) в структурата си.

Предвижда се този клас от материали да намери широко приложение за разделяне на газове, за акумулиране на водород, за катализатори и др. Друга насока на тематично обновяване на Центъра е въвеждането на хибридни материали на основата на фосфати, характеризиращи се с протонна проводимост в нискотемпературната област.

Усилията на Центъра ще бъдат фокусирани и върху методологично развитие на спектроскопски методи за изследване на локалната структура на материалите и нейното изменение в процеса на експлоатация. Особено внимание ще бъде отделено на разработването на *operando* инфрачервена спектроскопия за изследване на катализатори в условията на реални каталитични процеси. В България изследвания в тази област не са провеждани. Предвижда се също прилагането на стереомикроскопия за 3D характеризирани на твърди повърхности.

За моделиране на свойствата на материалите се предвижда да се въведе нов теоретичен подход на основата на *ab initio* молекулна динамика за изследване на

ТЕМАТИЧНО НОВИ ЗА UNION МАТЕРИАЛИ И МЕТОДИ ЗА ИЗСЛЕДВАНЕ

структурата и динамичните свойства на сложни многоатомни системи и на процесите, протичащи с тяхно участие.

Специфични цели на проекта са:

- създаване на Национална и Балканска мрежи по съвременни материали;
- въвеждане на нови, актуални за страната тематични и изследователски методики;
- осигуряване на ефективен трансфер на иновации към индустрията;
- повишаване нивото на обучение в областта на материалознанието;
- подпомагане на кариерното развитие на млади учени.

В следващите години научните изследвания на **ХФСУ** и **ИОНХ** ще се фокусират върху актуални за страната материали. Ще се повиши относителният дял на приложените изследвания, водещи до реализация. В тази връзка ще се прилагат два основни финансови механизма: (i) поощряване на високото качество на научни изследвания, директно обвързано с рейтинга на публикуваните научни трудове и (ii) поощряване на участието в приложни изследвания, пропорционално на постъпилите в Центъра средства.

Центърът ще осъществява ефективни работни връзки с (i) други факултети на Софийския университет, (ii) институти на

БАН (iii) ХТМУ и (iv) други научни центрове от страната. Предвижда се и изграждане до 2013 г. на Национална мрежа по нови материали, което на практика ще умножи възможностите на Центъра за привличане на нови партньори.

В тясно взаимодействие с изградените към **ХФСУ** и **ИОНХ** Центрове за трансфер на технологии ще се търсят активно контакти с МСП, а на по-късен етап и с по-крупни фирми с цел реализиране на иновационни продукти.

Предвижда се организиране на научни визити на водещи чуждестранни учени и на визити на учени от **UNION** във водещи научни центрове в чужбина. Ще бъдат органи-

зираны международни научни мероприятия.

Предвижда се към 2014 г. създаването на Балканска мрежа по нови материали. Непосредствено след включване на Центъра **UNION** като асоцииран партньор в Европейския институт по мултифункционални материали ще започне подготовка за приемането му като пълноправен член.



Основна форма на сътрудничество с Европейските учени ще бъде съвместното участие в договорни разработки по 7РП и други европейски програми и програми на НАТО.

За инициирането на контакти с индустриални партньори и за синхронизиране на плана за изследвания с индустриални проблеми планираме през първата година на проекта организиране на дискуссионна среща с участието на индустриални компании, с потенциален интерес към новите материали.

В края на финансиранния период се предвижда изготвяне на специален информационен бюлетин с основните резултати от дейността на Центъра за съвременни материали с възможно практическо приложение. Тези дейности ще бъдат улеснени от Центъра за трансфер на екологични технологии и иновации **TRANSMISSION** към **ИОНХ** и Центъра за трансфер на технологии при **ХФСУ**.



Институт по обща и неорганична химия
Българска академия на науките

Главен редактор: ст.н.с. II ст. д-р Даниела Ковачева;

Редактори: н.с. III ст. Геновева Атанасова и
н.с. I ст. д-р Елена Иванова.

Материали за публикуване се изпращат на адрес:
genoveva@svr.igic.bas.bg