

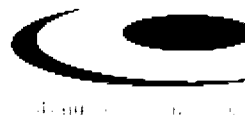


ФОНД
НАУЧНИ
ИЗСЛЕДВАНИЯ

Министерство на образованието и науката

„КОНКУРС ЗА ФИНАНСИРАНЕ НА НАУЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ – 2017 г.“

Наименование на конкурса:
Конкурс за финансиране на научни изследвания – 2017 г.
Основна научна област/тематично направление, в което проектът кандидатства:
Физически науки
Допълнителни научни области/тематични направления при интердисциплинарни проекти:
Заглавие на проекта:
Нови методи за получаване на графен и графенов оксид чрез модификация на аморфни и нано-дисперсни въглеродни фази
Базова организация:
Институт по електроника „Акад. Емил Джаков“- Българска академия на науките
Партньорски организации:
Софийски университет „Св. Климент Охридски“ Институт по обща и неорганична химия- БАН Институт по физикохимия „Ростислав Каишев“- БАН
Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):
Доцент д-р Теодор Иванов Миленов
Сума за изпълнение на проекта:
120 000.00 (сто и двадесет хиляди) лв.

**Резюме на проекта:**

Основната цел на проекта е да бъде създаден нов метод за синтез на графен/ графеноподобни фази. Основните хипотези, върху които ще съсредоточим изследванията са: изследване на възможностите за директен синтез на графен по CVD или LA на въглерод върху алтернативни подложки (Si, SiO₂ и т.п.) и изследване на възможностите за повърхностна модификация на въглеродни слоеве до графен/ графеноподобни фази. За верифициране на тези хипотези ще съсредоточим изследванията си в две основни направления:

1) Теоретични изследвания: с помощта на ab-initio молекулна динамика да бъдат моделирани и изследвани:

- тънки въглеродни и хидрогенирани въглеродни слоеве с различно съотношение на sp²- и sp³-хибридизираните въглеродни атоми, вариращи от графен до диамант и

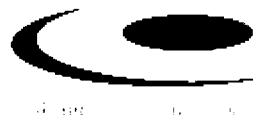
- нанодисперсни въглеродни фази (графенов оксид, нанодисперсни дефектен графен, нанотръбички, фулерени, сажди),

за да се изследват възможностите за модификация на слоеве с различен фазов състав и на нанодисперсни фази чрез повърхностна плазмена обработка и/или облъчване с електромагнитно лъчение с различна дължина на вълната и поток на енергията. Ще бъдат също така моделирани различни интерфейси: графен/ силициев карбид; графен/ силиций и подобни подложки, както и взаимодействието на графен и различни ароматни хидрокарбонови радикали, аниони и катиони и симулирани техните свойства.

2) Експериментални изследвания: експериментално верифициране на резултатите от числените симулации чрез характеризирани на тънки въглеродни и хидрогенирани въглеродни слоеве с комплексен състав (включително синтез на графен/графено-подобни фази чрез Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD), Chemical Vapor Deposition (CVD) и Laser ablation (LA) на въглерод) и модифициране на въглеродни и хидрогенирани въглеродни слоеве с различно съотношение на sp²- и sp³-хибридизираните въглеродни атоми в съответствие с резултатите от симулациите с цел проучване на възможността за получаване на графен чрез повърхностна модификация на въглеродни слоеве или директен синтез на слоеве от графен/ графеноподобни фази и нанодисперсни частици от графеноподобни фази/ графенов оксид, както и възможностите за възпроизводим синтез на графен върху подложки, различни от каталитичните и SiC.

За реализирането на първия фокус на изследвания ще бъдат създадени моделни клетки, съдържащи 200- 400 атома с различна хибридизация, а получените структури ще бъдат изследвани с помощта на молекулна динамика и метадинамика. За изчисляване на вибрационните спектри ще бъде приложен методът на автокорелационните функции.

За реализирането на втория фокус на изследвания планираме отлагане на въглеродни и хидрогенирани въглеродни слоеве с различен фазов състав, както по PECVD при температури близки до стайната, така и по високотемпературен CVD и LA методи– от преобладаващо или напълно sp³-хибридизирани въглеродни атоми до преобладаващо sp²-хибридизирани такива (включително синтез на графен/графено-подобни фази). Следващата стъпка ще бъде повърхностната обработка на слоевете в съответствие с резултатите от численото симулиране и експериментално доказване на адекватността на моделите.



Разпределение на сумата по проекта между базовата организация и партньорите
Организация: Институт по електроника „акад. Емил Джаков“- БАН
Сума: 70 000.00 (шестдесет и две хиляди) лв.
Организация: Софийски университет „Св. Климент Охридски“
Сума: 28 000.00 (двадесет и осем хиляди) лв.
Организация: Институт по обща и неорганична химия- БАН
Сума: 11 000.00 (единадесет хиляди) лв.
Организация: Институт по физикохимия „Ростислав Каишев“- БАН
Сума: 11 000.00 (единадесет хиляди) лв.



Членове на научния колектив

Организации/участници ¹	Бележка ²
Базова организация:	
Институт по електроника „акад. Емил Джаков“- БАН	
Ръководител на научния колектив	
Доц. д-р Теодор Иванов Миленов	
Участници:	
Доц. д-р Анна Огнемирова Диковска	
Доц. д-р Анастас Савов Николов	
Гл. Ас. д-р Стефан Колев Колев	ПД
Ас. д-р Ивайло Иванов Балчев	ПД
Химик д-р Драгомир Иванов Пишинков	ПД
Химик Иван Петков Петров	
Партньорска организация:	
Софийски университет „Св. Климент Охридски“	
Участници:	
Проф. дфн Евгения Петрова Вълчева	
Проф. дфн Валентин Николов Попов	
Проф. дфн Стоян Христов Русев	
Доц. д-р Виктор Атанасов Атанасов	
Докторант Антон Димитров Зяпков	ДО
Докторант Калоян Владимиров Генков	ДО
Партньорска организация:	
Институт по обща и неорганична химия- БАН	
Участници:	
Доц. Д-р Ивалина Аврамова Аврамова	
Партньорска организация:	
Институт по физикохимия „Ростислав Каишев“- БАН	
Участници:	
Доц. Д-р Георги Вячеславович Авдеев	



<i>Организации/участници¹</i>	<i>Бележка²</i>	<i>Подпис³</i>
Чуждестранни участници в колектива на Базовата организация:		
доц. д-р Фредерик Теппе Лаборатория „Шарл Кулон“ (CNRS), Университет на Монпелие, Монпелие, Франция		
проф. д-р Чих-Уей Луо Лаборатория “Свръх- бърза динамика”, Национален Университет Чао-Тънг, Хсин-Чу, Тайван, Република Китай		