



„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:
Химически науки
Допълнителни научни области/тематични направления при интердисциплинарни проекти:
Заглавие на проекта:
Моделиране, оптимизация и модификация на нанопорьозни анодни оксидни филми като катализатори за фотоелектролиза на вода
Базова организация:
Химикотехнологичен и Металургичен Университет
Партньорски организации:
Институт по Електрохимия и Енергийни Системи - БАН
Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):
Проф. дхн Мартин Славчев Божинов
Сума за изпълнение на проекта:
120 000 лв.

Резюме на проекта:
<p>Цел на настоящия проект е детерминистичното моделиране на процесите на формиране на нанопорьозни оксиди на вентилни метали (титан, молибден, волфрам) чрез анодно окисление и модификацията им с наночастици на преходни метални оксиди за получаване на водород чрез фотоелектролиза на вода. Тази цел ще бъде постигната чрез изпълнение на следните конкретни задачи:</p> <ol style="list-style-type: none">1) Многомашабно моделиране на процесите на растеж и разтваряне на бариерни филми, зараждане и растеж на нанопорьозни структури върху вентилни метали, осъществено с помощта на следните методи: чрез DFT изчисления ще бъдат моделирани процесите на адсорбцията на водни молекули върху титанов, волфрамов и молибденов оксид. Резултатите ще бъдат използвани за оценка на енергиите на взаимодействие, скоростните константи и транспортни коефициенти, които характеризират процесите на растеж на оксид, разтваряне и зараждане на порите на границата оксид/електролит. Получените оценки ще бъдат приложени за калибриране на детерминистичен континуум модел от ново поколение на процеса на порообразуване в металните оксиди при анодно окисление.



- 2) Характеризиране на състава, структурата и морфологията на нанопорьозните анодни оксиди като функция на режима на тяхното получаване чрез електрохимични, фотоелектрохимични и аналитични методи за анализ на тънки филми
- 3) Оптимизация на процесите на формиране на нанопорьозните слоеве чрез количествена оценка на влиянието на ключови параметри – състав на електролита, режим на анодно окисление, температура – върху структурата и степента на подреденост на нанопорьозни и нанотубуларни структури на оксиди на вентилни метали
- 4) Модификация на нанопорьозните и нанотубуларни структури чрез отлагане на оксидни частици върху тяхната повърхност и във вътрешността на тяхната структура. Характеризиране на комплексните наноструктури чрез електрохимични, фотоелектрохимични и аналитични методи за анализ на тънки филми. Количествено кинетично моделиране на процесите на модификация на нанопорьозните структури с метални и оксидни наночастици.

Разпределение на сумата по проекта между базовата организация и партньорите**Организация: Химикотехнологичен и Металургичен Университет**

Сума: 72 000 лв.

Организация: Институт по Електрохимия и Енергийни Системи - БАН

Сума: 48 000 лв.

Обща сума за изпълнение на проекта: 120 000 лв.**Членове на научния колектив**

Базова организация:		
Химикотехнологичен и Металургичен Университет - София		
Ръководител на научния колектив		
Проф. дхн Мартин Славчев Божинов		
Участници:		
Гл. ас. д-р Мина Йорданова Станчева - ХТМУ	МУ	
Гл. ас. д-р Васил Иванов Карастоянов		
Партньорска организация:		
Институт по Електрохимия и Енергийни Системи - БАН		
Участници:		
Проф. дхн Евелина Павлова Славчева Доц. д-р Ива Георгиева Бетова Докт. Маг. Елица Станиславова Петкучева Денис Станиславов Паскалев	ДО МУ	



ФОНД
НАУЧНИ
ИЗСЛЕДВАНИЯ

Министерство на образованието и науката