

## **Program nau noistraživa kog rada Fakulteta za fizi ku hemiju za period 01.01.2011-31.12.2014.**

Osnov nau noistraživa ke delatnosti Fakulteta u navedenom periodu predstavlje e aktivnosti vezana za ostvarivanje zadataka istraživa kih projekata finansiranih od strane *Ministarstva za prosvetu, nauku i tehnološki razvoj* iji je nosilac A) Fakultet, ili B) druga nau na organizacija, u delovima u kojima u estvuju saradnici Fakulteta.

### **A. PROJEKTI IJI JE NOSILAC FAKULTET**

#### **1. Projekt 45014: Litijum-jon baterije i gorivne elije: istraživanje i razvoj**

##### **Tip projekta: Integrisana Interdisciplinarna Istraživanja (III)**

Sadržaj projekta podrazumeva razvoj metoda sinteze i ispitivanja osobina anodnih i katodnih materijala submikronske do nanodisperznosti, metode pripreme i ispitivanje osobina elektrolita, metode pripreme i ispitivanja osobina strujnih kolektora, kao i formiranje kompletnih prototipova baterija tipa litijum-jon i njihovo ispitivanje u radnim uslovima sa stanovišta kulonskog kapaciteta, snage i vremena života merenog brojem ciklusa punjenja i pražnjenja. Bi e ispitivan i uticaj masenog udela elektroprovodnih aditiva i polimernih veziva u elektrodnim materijalima na kapacitet i snagu izvora i cikli ni život.

Fizi ka karakterizacija elektrodnih materijala podrazumava: dipserznost (TEM, SEM) elektri nu provodljivost, holovsku pokretljivost, fotoakusti nu adsorpciju, strukturna (X-difraktometrija), ramanska i IR ispitivanja. Kompjuterskim modeliranjem i eksperimentalnim metodama radi e se dizajniranje prototipova litijum-jon baterija velike snage, za dualni sistem napajanja 42/14 V, sa stanovišta optimizacije termi kog balansa, pouzdanosti i bezbedne upotrebe. Paralelno, bi e razvijane metode za testiranja sigurnosti litijum-jon izvora u ekstremnim uslovima rada. Cilj je i studija proizvodne linije za masovnu proizvodnju litijum-jon baterija. Radi pra enja svetskih trendova u oblasti gorivnih elija, bi e ispitivani elektrodni materijali, membrane i elektroliti gorivnih elija, kataliti ki i izotopski efekti, i mogu nosti razvoja hibridnih pogonskih sistema *litijum-jon baterije–gorivne elije*.

U okviru projekta se trenutno rade dve doktorske teze i dva master rada iz tematike projekta. O ekuje se uklju enje novih kandidata sa doktorskih studija u toku naredne dve godine.

#### **2. Projekt 172018: Porozni materijali na bazi oksida u zaštiti životne sredine od genotoksi nih supstancija**

##### **Tip projekta: Osnovna Istraživanja (OI)**

Predmet istraživanja u ovom projektu su postupci i materijali za efikasno uklanjanje toksih supstancija, koje dospevaju u okruženje (vodene tokove, zemljište i hranu), a koje ispoljavaju genotoksi nost. Istraživanja su fokusirana na tri tipa genotoksi nih supstancija: jone teških metala, grupu organskih jedinjenja (hlorofenoli, hlorovani pesticidi, alkilfenoli i bisfenoli) i mikotoksine. Cilj je da polutanti u prvom stupnju budu adsobovani i akumulirani, a zatim u drugom stupnju da se ispita da li ih je mogu e potpuno oksidovati do ugljendioksida i vode. Kao sistemi na kojima se odvija adsorpcija i/ili kataliti ka reakcija primenjuju se nanoporozni materijali na bazi oksida, koji su neškodljivi po životnu sredinu, a imaju veliki adsorpcioni kapacitet i ispoljavaju visoku kataliti ku aktivnost za transformaciju polutanata od interesa. Pored razli itih klasa oksida ovim istraživanjima su obuhva eni minerali (klinoptilolit i bentonit), sinteti ki zeliti (MFI, BEA, FAU) i kompozitni materijali na bazi zeolita. Projekat

ujedinjuje sedam istraživačkih laboratorija, a ostvarivanje zadatih ciljeva obezbeđeno je ekipom koju čine mladi istraživači i istraživači sa iskustvom u oblastima od značaja za projekat.

U okviru projekta 172018 na Fakultetu za fiziku hemiju su u izradi dve doktorske disertacije. Uključuje nove kandidata za izradu doktorskih disertacija predviđena se u 2013. godini.

### **3. Projekt 172015: Dinamika nelinearnih fizičko-hemijskih i bioloških sistema sa modeliranjem i predviđanjem njihovih ponašanja pod neravnotežnim uslovima**

#### **Tip projekta: Osnovna Istraživanja (OI)**

Predmet istraživanja ovog multidisciplinarnog projekta su složeni fizičko-hemijski i biohemijski reakcioni sistemi u uslovima udaljenim od termodinamičke ravnoteže. Ovi složeni, praktično uvek nelinearni sistemi se pod neravnotežnim uslovima mogu spontano samoorganizovati u prostorno-vremenske strukture, kao što su multistabilna stanja, oscilacije i deterministički kaos. Iako je nelinearna dinamika jedna od osnovnih nauka koje se brzo razvijaju, ova dinamika stanja nisu dovoljno proučena i zbog toga je njihova upotreba u praktične svrhe ograničena.

Glavni cilj projekta je kvantitativna karakterizacija pomenutih dinamičkih stanja u izabranim sistemima, rasvetljavanje odgovarajućih mehanizama i dizajniranje primene. Ovaj ambiciozni cilj je moguće ostvariti zajedničkim radom istraživača koji se bave baznim istraživanjima u oblasti fizike hemije, matematike i biohemije i praktičnom primenom u oblasti tehnologije, farmacije i medicine. Bazna istraživanja se odnose na ispitivanja dinamike homogenih i heterogenih fizičko-hemijskih i biohemijskih sistema u uslovima zatvorenog i otvorenog reaktora, primenom poznatih i dorađenih eksperimentalnih, teorijskih i numeričkih metoda analize. To omogućava ispitivanje univerzalnih principa samoorganizacije i postavljanje što manjih modela za predviđanje ponašanja sistema, posebno onih u farmaciji, biomedicini, ekologiji, katalizi i pri dizajniranju novih materijala.

### **4. Projekt 172040: Struktura i dinamika molekulskih sistema u osnovnim i pobuđenim elektronskim stanjima**

#### **Tip projekta: Osnovna Istraživanja (OI)**

Predmet istraživanja su molekuli različitih dimenzija: od manjih, radikala i jona koji su identifikovani u interstelarnom prostoru, sve do velikih molekula značajnih za biološke sisteme. Koristi se aparat kvantne mehanike da bi se opisala stanja i procesi koji se u njima odvijaju: *ab initio* metode koje uključuju elektronske strukturne metode (za opis osnovnih i pobuđenih elektronskih stanja), varijacioni i perturbacioni pristupi nuklearnom problemu, kao i metode kvantne dinamike. Planira se modelovanje infracrvenih spektara, razumevanje vibranskih nivoa u prostorno i spinski degenerisanim elektronskim stanjima, određivanje momenata prelaza između vibranskih stanja od interesa, određivanje koeficijenata brzine intersistemskih prelaza, drugim rečima predikcija spektara koji nisu snimljeni, kao i objašnjenje postojećih.

U okviru projekta 172040 na Fakultetu za fiziku hemiju su u izradi tri doktorske disertacije i tri master rada. Uključuje nove doktoranata se predviđena u 2013. godini.

### **4. Projekt 172043: Elektroprovodni i redoks-aktivni polimeri i oligomeri: sinteza, struktura, svojstva i primena**

#### **Tip projekta: Osnovna Istraživanja (OI)**

Osnovni predmet i cilj ovog istraživačkog projekta su sinteza, karakterizacija i primena novih elektroprovodnih, redoks-aktivnih organskih i neorganskih polimera i oligomera. U projektu će se

proučavati molekulska struktura, morfologija i fizičko-hemijska svojstva (električna provodljivost, oksido-redukcijske karakteristike, termička i solvolitička stabilnost, biohemijska aktivnost, magnetska svojstva) velikog broja sintetisanih materijala: a) novih elektroprovodnih i redoks-aktivnih poliaromatičnih amina, poliheterocikličnih aromatičnih jedinjenja) i oligomera aromatičnih amina i heterocikličnih aromatičnih jedinjenja za senzore, katalizu, zaštitu od korozije; b) polioksometalata za katalizatore, gorivne ćelije i biohemijske agense; c) novih mikro/nanostrukturnih elektroprovodnih polimera i nanokompozita elektroprovodnih polimera sa metalnim nanoestricama, oksidima metala i metaloida, alumosilikatima, polioksometalatima, sintetičkim polimerima i biomakromolekulima, za potencijalne primene u katalizi, fotokatalizi, elektrokatalizi, gorivnim ćelijama, senzorima, baterijama, superkondenzatorima, zaštiti od korozije i adsorpciji toksičnih i ekotoksičnih supstanci; d) novih karbonizovanih mikro/nanostrukturnih elektroprovodnih polimera za potencijalne primene u elektrokatalizi i gorivnim ćelijama.

U okviru projekta 172043 u izradi su tri doktorske disertacije. Uključuje nove kandidata za izradu doktorskih disertacija predviđena se u 2013. godini.

## **B. PROJEKTI U KOJIMA UČESTVUJU SARADNICI FAKULTETA, A NISU NOSIOCI DRUGE NAUČNE ORGANIZACIJE:**

### **1. Projekt 41005: Biomarkeri u neurodegenerativnim i malignim procesima**

**Tip projekta:** Integrisana Interdisciplinarna Istraživanja (III); nosilac: Biološki fakultet Beograd

Osnovni cilj projekta je pronalaženje pouzdanih *in vivo* biomarkera za dijagnostiku, prognozu i praćenje terapijskog odgovora u neurodegeneraciji i kanceru.

U ovo translaciono istraživanje uključeno je 7 institucija (fakulteti, instituti, klinike) i stručnjaci različitih profila (fizikohemijari, biolozi, lekari) kao i više mladih istraživača i inostranih saradnika. Inicijalno je usobno povezana potprojekta:

- **Ekperimentalni markeri** - bazna studija molekulskih i ćelijskih markera vezanih za mehanizme i patogeneze;
- **Preklinički markeri** - MRI i EPR studija endogenih (slobodni radikali i metali) i egzogenih (kontrastne ćelijske nano-sonde) markera na animalnim modelima;
- **Klinički markeri** - MRI istraživanja odabranih biomarkera na pacijentima potkrepljena sa *ex vivo* EPR.

Ispitivanja na *in vitro* odnosno na *in vivo* sistemima transliraju se kao dijagnostici pacijenata obolelih od ALS, Alchajmerove bolesti, ishemijske, kao i od karcinoma dojke.

Osnovna istraživanja bave se mehanizmima inflamacije i ishemijske, jonima i slobodnim radikalima kao markerima patoloških procesa, stanjem i organizacijom metaboličkih organela i korelacijom neuropatologije i maligniteta.

Preklinička faza doprinosi razumevanju markera oksidativnog statusa i uloge slobodnih radikala, kao i stepena infiltracije makrofaga/mikroglije i limfocita i integriteta hematoencefalne barijere. Klinički potprojekat treba da utvrdi ciljne MRI markere i razvije optimalne protokole akvizicije.

### **2. Projekt 172019: Efekti dejstva laserskog zračenja i plazme na savremene materijale pri njihovoj sintezi, modifikaciji i analizi**

**Tip projekta:** Osnovna Istraživanja (OI); nosilac: Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Beograd

Projekat obuhvata ispitivanje uticaja laserskog zračenja na površinu različitih materijala (morfološke promene) kao i ispitivanje laserski indukovane plazme (spektralni sastav

i dijagnostika) u različitim atmosferama i kontaktu sa različitim materijalima, uključujući i ispitivanja mogućnosti njene primene za hemijsku analizu materijala. Deo projektnog zadatka se odnosi na proučavanje uticaja laserski indukovane plazme na osobine materijala-mete.

### **3. Projekt 172045: Vodoni na energija - razvoj novih materijala: elektroliti ko dobijanje vodonika, vodonik gorivne ćelije, izotopski efekti**

**Tip projekta:** Osnovna Istraživanja (OI); nosilac: Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Beograd

Ovaj projekt se bazira na proučavanju fundamentalnih procesa u okviru ciklusa energija-vodonik-energija: elektrolizom, vodonikom i gorivnim ćelijama, kao i povećanjem efikasnosti i ekonomičnosti ciklusa kroz razvoj novih materijala. Opšti ciljevi projekta se ostvaruju kroz projektne teme i zadatke u pravcu razvoja novih katalizatora i aktivatora za elektrolizu vode, a u oblasti gorivnih ćelija razvoj novih, visokotemperaturnih membrana i neplatiniranih katalizatora. Takođe, vrši se istraživanje D/H izotopskog efekta u gorivnim ćelijama i alkalnoj elektrolizi, izučavajući se efikasnost separacije i uticaj izotopskog efekta na ukupne troškove energija-vodonik-energija ciklusa izazvanjem teške vode kao nusproizvoda. Proučavanje fundamentalnih procesa u oblasti elektrolize, kao i u radu vodonik gorivnih ćelija, pruža uvid u mogućnosti i nedostatke u postojećim konstrukcionim rešenjima i omogućava razvoj demonstracionih uređaja i učila za srednjoškolske i visokoškolske institucije, u cilju obrazovanja kadrova u zemlji i širenja znanja na polju vodonikove energije.