



ОТЧЕТЕН ДОКЛАД

на Института по обща и неорганична химия за 2005 г.

1. Проблематика на ИОНХ

1.1. Връзка с политиките и програмите от „Стратегически цели и функционални приоритети на БАН за периода до 2007 г.”

Научно-изследователската дейност в ИОНХ е насочена към неорганичното материалознание и опазване на околната среда, което попада в приоритетните програми на БАН до 2007 г., а именно: програма 1.2. “Устойчиво развитие и използване на природните и суровинни ресурси на България”, програма 1.3. “Повишаване конкурентноспособността на научно-изследователския продукт” и програма 2.1. “Технологично развитие, основано на научна компетентност и нови знания”. По-конкретно, в ИОНХ се изучават синтеза, структурата и свойствата на нови материали за оптоелектрониката, за акумулиране и преобразуване на енергия, свръхтвърди материали, биокерамики, катализатори и сорбенти за очистване на околната среда. Изучават се нови координационни съединения с потенциална биоактивност. Предлагат се и нови “зелени” технологии за оползотворяване на химическите ресурси на Черно море. Разработват се методи за определяне съдържанието на примеси както в обема, така и на повърхността на неорганични материали, а също така сензори и методи за аналитичен контрол на обекти от околната среда.

През 2005 г. в Института по обща и неорганична химия бе създаден Център на компетентност за многофункционални материали и нови процеси с екологична насоченост, в рамките на проект към Шестата рамкова програма на Европейската комисия. Задачите на този център - създаването на условия за научно израстване и реализация на млади учени, както и осъвременяване на наличната материална база на Института, съответстват и на програмата на БАН 1.4 “Устойчиво развитие на научния потенциал”.

2. Резултати от научната дейност през 2005 г.

2.1. Най-важни научни постижения

Нови неорганични съединения и методи на синтез. Установено е, че дотираните с хром (III) йони монокристали от натриево-алуминиев оксиборат са подходящи материали за нелинейни оптични преобразуватели и активни среди за твърдотелни лазери. Разработени са нови методи за синтез на тънки слоеве от титанов диоксид-калаен диоксид, кобалтов ферит, сребърен сулфид, живачни халкогениди и алуминиев нитрид с потенциално приложение като сензори, електродни материали и материали за електрониката. Синтезирани са наноструктурирани фази от циркониеви молибдат, волфрамаат и ванадат, притежаващи отрицателен коефициент на термично разширение. По метода на преохладената стопилка са синтезирани лантанови молибдати – материали с висока йонна проводимост. Получен е и изследван в биоаналогична моделна система стабилен във времето аморфен прекурсор за калциево-фосфатна биокерамика.

Охарактеризиране на вещества. Изследвано е влиянието на лантановия оксид върху структурата на трикомпонентни молибдатни стъкла. Чрез рентгенова дифракция и инфрачервена спектроскопия са изучени кристалните и молекулните структури на берилиеви сулфати и селенати. Изследвана е връзката между кристалната структура и зарядовото и магнитно подреждане в съединения производни на калциевия манганат. Развита е ЕПР спектроскопията като метод за изучаване на локалната структура на парамагнитните центрове в литиево-никелово-манганови оксиди с шпинелна и слоеста структура. Приложени са квантово-химични методи за обясняване на фотохимичните и фотофизичните свойства на серия от метални комплекси на кумаринови производни. Изследвани са нови комплекси на Cu(II) с β -агониста кленбутерол, както и нови комплекси на рутений (III) с 2-амино-тиазолови лиганди, един от които показва значителна противотуморна активност.

Адсорбция и катализ. Изучена е кинетиката и механизма на разлагане на озон и пълно каталитично окисление с озон върху сребърни, медни и манганови катализатори върху носители зеолити, мезопорьозни материали др. С инфрачервена спектроскопия на молекули-сонди са наблюдавани нови неklasически карбонили на платината при зеолити от типа Pt-ZSM-5 и е установена тяхната структура. Посредством квантовохимични пресмятания са изследвани процесите на адсорбция на азота и кислорода върху алкални и алкалоземни катиони в зеолити. Построени са корелационни диаграми за реда на относителната активност в зависимост от типа и разположението на катионите.

1.2. Най-важни научно-приложни постижения

Нови материали и продукти. Повърхностно модифициране на катодни материали за литиево-йонни батерии на основата на литиево-кобалтови-никелови оксиди с електрохимично активния литиев кобалтит е ефективен подход за подобряване на електрохимичната им стабилност при продължително циклиране, особено при температури над стайната. Съвместно с колеги от ИЕСС са синтезирани съдържащи силиций литирани железни оксиди, които имат добри характеристики като аноден материал за литиево-йонни батерии. Установено е, че механично сплавен композит от Mg_2Ni и два 3d-метала е удачен като материал за акумулиране на водород при ниски температури. По метода на утаяване в пори са синтезирани активни катализатори за очистване на азотни оксиди на основата на медно-манганови оксиди върху носител алуминиев оксид. Получени са носители за катализатори на основата на алуминиев оксид с якостни и текстурни параметри, правещи ги подходящи за експлоация в широк температурен интервал. Проведени са тестови изпитания за бронезащитните свойства на свръхтвърда и свръхлека боркарбидна керамика. Разработено е ново поколение йон-селективни поточно-инжекционни сензори за цианид на основата на електрохимично отложени филми от сребърни халкогениди.

Опазване на околната среда. Предложен е нов подход за оценка на реалния екологичен статус на системите река-естуар-море на Камчия, Ропотамо, Ахелой и Двойница. На базата на термодинамично моделиране са получени данни за неорганичните химични форми на главните и биогенните елементи и на тежките метали в системите на Камчия и Ропотамо. Изследвано е разпределението на тежки метали между соления разтвор, колоидните частици и биотата в черноморска луга, което може да се използва и за оценка на замърсяването в района на Бургаските и Поморийските солници. Намерени са условията за извличане от питейни води на $As(III)$ и $As(V)$ след сорбция върху модифициран с ферихидроксид силикагел.

Методи за анализ. Чрез фотоелектронна спектроскопия са проведени изследвания на ефекта от лазерна аблация върху структурата и химическото състояние на повърхността на медни и алуминиеви пластинки. Установено е, че полученият в ИОНХ хибриден органично-неорганичен сорбент е селективен по отношение на златото като притежава висок сорбционен капацитет. Разработен е метод за определяне на злато в геоложки проби с използването на новия сорбент. Разработена е методология за атомно-емисионно определяне на итрий и редкоземни елементи в многокомпонентни проби, получени след обогатяване на природни редкоземни концентрати. Създадена е база данни за големината на спектралните пречения при атомно-емисионното определяне на голям брой елементи съдържащи се в проби от води и почви от района на Комбината за цветни метали в Пловдив. Установено е, че термичната декрипитация е удачен метод на пробоподготовка при анализа на флуидните включения в хидротермален кварц.

2.3. Най-важни научни и научно-приложни постижения в резултат от международното сътрудничество

В изпълнение на програмата с френски учени е установено, че катионното разпределение в монокристалите на синтезирания по-рано нов стронциево-литиево-хромен титанат е различно от това в поликристалните образци. Съвместно с учени от Германия са синтезирани нови литиеви интеркалационни съединения със слоеста структура на основата на оксидите на лития, алуминия и никела, които съдържат литиеви йони и в металния слой. Заедно с учени от Испания са изследвани структурите на изходни и химически делитирани съдържащи титан литиево-манганови шпинели и е установено, че структурата на делитираните шпинели принадлежи на особен клас точково дефектни оксиди. В сътрудничество с немски и швейцарски учени са проведени теоретични изследвания върху механизма на обменни магнитни взаимодействия в цианометалати. С помощта на теорията на функционала на плътността е изследвано влиянието на ефекта на Ян-Телер върху магнитните свойства на ниско-спинов хексацианови комплекси на манган(III) и желязо(III). Съвместно с чешки учени са определени кристалните структури и диелектричните свойства на двойни соли на глицина и цинковия дихлорид с оглед на приложението им в електрониката. Съвместно с учени от Сърбия е изследван дотирация ефект на малки добавки от манганов оксид към високодисперсни платинов катализатори при реакцията на окисление на въглеродороди. Установена е ролята на взаимодействието между мангана и платината за повишаване на активността на катализаторите. Заедно с френски изследователи посредством инфрачервена спектроскопия е изследвана адсорбцията на CO върху платинов и родиеви катализатори върху носители морденит и зеолит ZSM-5, като е наблюдавано формирането на неklasически карбонили и са изучени преобразуванията им. Експериментално намерените честоти на родиевите дикарбонили съвпадат с теоретично изчислените. Съвместно с учени от Канада и Германия е изследвана адсорбцията и десорбцията на NO върху повърхността Ru(001) покрита с кислороден слой със симетрия (2x2)-3O. В изпълнение на дългогодишното сътрудничество по химия на рения с Руската академия на науките е установена биоаккумуляция на рения в растенията.

3. Международно научно сътрудничество на ИОНХ

3.1. В рамките на договори и спогодби на ниво Академия

През изтеклата 2005 г. е работено по 6 теми по междуакадемични договори и споразумения – 2 с Испания, 1 – с Франция, 1 – с Румъния, 1 – със Сърбия и – с Чехия.

3.2. На институтско ниво

През 2005 г. е работено по един договор на институтско ниво – със Сърбия. Освен това е работено по 5 международни проекта с финансиране от чужбина: 2 проекта финансирани от ЕК, 1 – от фондацията Ал. фон Хумболдт (Германия), 1 – от НАТО и 1 – от българо-френското сътрудничество по линия на НТС, където българската част от изследванията се финансира от МОН. В края на 2005 г. бе одобрен проект по линия на асоциация ИНТАС, изпълнението на който ще стартира през 2006 г.

Освен в изброените проекти от международни договори, учените от ИОНХ участват в интензивно сътрудничество на базата на лични договорености с колеги от научни институции от Испания, Австрия, Германия, Франция, САЩ, Русия и др. Извън ЕБР, 17 са командировките за извършване на научни изследвания в чужбина, като 6 от тях са по програмата на ЕК “Достъп до изследователски инфраструктури”. Девет са командировките за участие в научни прояви, като основно разходите са за сметка на приемащата страна и/или собствени средства на ИОНХ.

Двата проекта, финансирани по линия ЕК, спадат към “Specific Support Action” на БРП. Единият от тях има за цел да бъде създадена международна интердисциплинарна експертна група „Чисто черно море”, която да се концентрира върху събиране и оценка на информацията относно: източници на замърсяване на Черно море, рискови групи съединения и тяхното екотоксично действие, приоритетни екологични проблеми на крайбрежната зона, както и да спомага за бъдещи партньорства и участие в международни проекти и програми свързани с решаване на екологичните проблеми на Черно море.

Вторият проект, финансиран от ЕК има за цел ИОНХ да се превърне във водещ регионален научен, консултантски и образователен център за развитие и управление на многофункционални материали и нови процеси с екологична насоченост (акроним MISSION). Тематичната област на проекта включва: (1) материали за акумулиране и преобразуване на енергия; (2) сорбенти и катализатори за опазване на околната среда; (3) мениджмент на природни химически ресурси, съобразен с опазване на околната среда; (4) метрологичен контрол и стандартизация. За тази цел в ИОНХ започна реализирането на серия от задачи: (1) фокусиране на изследователската, консултантската и образователна дейност на ИОНХ върху екологичните аспекти на многофункционални материали и нови процеси; (2) засилване на контактите с водещи изследователски центрове в Европа (3) подпомагане на кариерата на млади научни работници и специалисти (4) разпространение на научни знания в научната общност, науката и обществото. По проекта се предвижда закупуване на научна апаратура – прахов рентгенов дифрактометър и атомно-абсорбционен спектрометър на обща стойност около 190 000 евро, като търгът за закупуването им ще бъде обявен в началото на 2006 г.

4. Участие на ИОНХ в подготовката на специалисти

В ИОНХ няма учени, които четат лекционни курсове или водят семинарни занятия или упражнения във висши учебни заведения. През годината в ИОНХ са изработени и защитени 4 дипломни работи. Редовните докторанти към 31.12.2005 г. са били 20, като 12 от тях са зачислени през 2005 г., в това число 6 по проекта MISSION. Зачислен е и един докторант на самостоятелна подготовка. Броят на защитилите образователната и научна степен “доктор” през 2005 г. е 6, а един учен от ИОНХ е придобил научната степен „доктор на химическите науки”. От 2004 г. действа тригодишен договор за сътрудничество между ЮЗУ “Неофит Рилски” – Благоевград и ИОНХ на тема “Образование и научни изследвания по получаване и охарактеризиране на съвременни неорганични материали”.

5. Стопанска дейност на ИОНХ

ИОНХ има сключени 3 договора за отдаване под наем на помещения със следните фирми:

- “Комбо 1”- наема 10 кв.м. в Механична работилница на ИОНХ за обща стойност 40 евро и по 50 лв. на месец за наем на ДМА по опис (4 машини);
- ЕТ “Виларг”- кафе-автомат на 3-тия етаж – наем 30 лв на месец;
- ЕТ ”Оптим” (в мазето) - складово помещение за съхраняване на химикали (10 кв.м) - 20 евро на месец.

Всички фирми редовно плащат наема и режийните, поради което са подписани анекси за продължаване сроковете на договорите за наем с още по една година, с изключение само на фирма “Вива инженеринг”, с която имахме договор до 31.07.2005 г. Поради необходимостта от допълнителни помещения във връзка с изпълнението на проекта MISSION договорът бе прекратен. Всички отчисления за БАН-ЦУ са преведени, след разчистване със съответните данъци.

Друг вид стопанска дейност за ИОНХ-БАН е производството и реализацията на 3 продукта от ЛАНС-Бургас, като и приходите от извършване на анализи. От 27.04.2005 г. ИОНХ-БАН има регистрация по ДДС за стопанска дейност. Беше ни отказано правото за ползване на режима по чл.92 във връзка с проекта MISSION от ТДД-София, което беше обжалвано в предвидения от закона срок.

6. Кратък анализ на финансовото състояние на звеното

За 2005 г. основните постъпления са като следва:

1. Поети осигурителни вноски за 2005 г.(парт.69-00) – 311 588 лв;
2. Предоставени трансфери(парт.66-02) – 922823 лв. по Единна бюджетна сметка по системата за единни бюджетни разплащания СЕБРА;
3. От доходи за защиты в СНС към ИОНХ-БАН – 31 886 лв;
4. От договори по международни програми – 809 731лв ;
5. От продажба на продукцията – 64 916 лв;

От съществено значение за ИОНХ-БАН е успешното участие в Шестата рамкова програма на Европейската комисия – проектът MISSION спечели финансиране от 800 000 евро за 36 месеца. Това обяснява и по-големите разходи за дейност Международни договори и програми и като цяло за годишния отчет, тъй като първият транш от 400 000 евро беше преведен на 27.05.2005 г.

Основната част от бюджетната субсидия в размер на 680 921 лв. е изразходвана за заплати, а за стипендии – 53 880 лв. По проект MISSION бяха обявени конкурси и бяха зачислени 6 докторанта. Така общият брой на обучаваните в Института редовни докторанти се увеличи на 20. По 66 ПМС има назначени 5 млади специалисти, чиито заплати и съответните осигуровки също се осигуряват от проекта MISSION.

От субсидията се покриват основните приоритети - заплати, осигуровки и стипендии, а останалата част се изразходва само за профилактична храна за работа при вредни условия на труд. Разходите за материали - химикали, сгъстени газове, канцеларски материали, телефонни услуги, стъклодувни услуги и абонаментно поддържане на машини, се покриват основно със собствени средства.

В края на 2005 г. Институтът по обща и неорганична химия получи като дарение от германската фондация „Александър фон Хумболт” компютърен клъстер и софтуер за квантово-химични изчисления на обща стойност около 25 000 лв. Дарението е по повод Хумболтовата стипендия на колегата Михаил Атанасов и предлага възможност за паралелни пресмятания, което значително редуцира изчислителното време. Наличието на този клъстер ще насърчи и улесни работата на младите специалисти в Института.

Институтът получи дарение и от датската фирма „Халдор Топсо” – прецизен газов анализатор за кислород на стойност 8000 лв.

7. Състояние и проблеми на ИОНХ в издателската и информационната дейност

Собствена издателска дейност ИОНХ няма. Негови специалисти участват активно в редакционната колегия на "Bulgarian Chemical Communications". Срещу книжките на това списание получаваме по кноогообмен специализирани чужди списания по химия. Това е особено важно при финансовите проблеми на библиотечното ни дело, при което в Химическата библиотека на БАН не се получават основни специализирани списания, нови научни книги и учебници. Командировките в чужбина, помощта на колеги от научни институции в чужбина и отчасти справките по Интернет (списанията на свободен достъп) са единствения достъп до съвременна научна литература. През 2005 г. стана възможно използването на базата данни SCOPUS, даваща възможност за достъп до резюмета и цитирания в специализираната научна литература, Интернет-връзката на ИОНХ се подобри значително след закупуването на новия сървър. Проблемът с компютърните вируси бе актуален и през изминалата година. Необходимо е да се закупи мрежова антивирусна програма за сървъра на ИОНХ.

СПИСЪК

на публикациите на учените през 2005 г.

2.1. Научни публикации в списания и поредици

2.1.1. в чужбина

2.1.1.1. излезли от печат през 2005 г.:

1. A. Detcheva, I. Havezov, *Trans. Univ. Kosice* (1), 18-24, (2005).
2. Л. В. Борисова, Ю. В. Демин, Н. Г. Гатинская, В. В. Ермаков, В. А. Рябухин, О. Д. Божков, *Журн. анал. хим.* **60**, 97-103, (2005).
3. V. Vassileva, G. Gencheva, E. Russeva, S. Varbanov, R. Scopellini, E. Tashev, *Inorg. Chim. Acta* **358**, 3671-3679, (2005).
4. K. Chakarova, M. Mihaylov and K. Hadjiivanov, *Microporous Mesoporous Mater.* **81**, 305-312 (2005).
5. K. Chakarova, M. Mihaylov and K. Hadjiivanov, *Catal. Commun.* **6**, 466-471, (2005).

6. E. Ivanova, M. Mihaylov, F. Thibault-Starzyk, M. Daturi and K. Hadjiivanov, *J. Catal.* **236**, 168-171, (2005).
7. M. Mihaylov, K. Chakarova, K. Hadjiivanov, O. Marie and M. Daturi, *Langmuir* **21**, 11821-11828, (2005).
8. I.N. Kuznetsova, V. Blaskov, I. Stambolova, L. Znaidi, A. Kanaev, *Material Letters* **59**, 3820-3823, (2005).
9. I. Stambolova, A. Toneva, V. Blaskov, D. Radev, Ya. Tsvetanova, S. Vassilev, P. Peshev, *J. Alloys and Comp.* **391**, L1-L4, (2005).
10. H. Mikosch, E. Uzunova, G. Nikolov, *J. Phys. Chem. B* **109**, 11119-11123, (2005).
11. A. Batchvarova, Y. Dimitriev, R. Iordanova, *J. Non-Crystalline Solids* **351**, 998-1002, (2005).
12. D. Klissurski, D. Radev, R. Iordanova, M. Milanova, *Chem. Sustain. Development* **13**, 225-228, (2005).
13. D. Klissurski, M. Mancheva, R. Iordanova, B. Kunev, *Chem. Sustain. Development* **13**, 229-232, (2005).
14. Y. Dimitriev, R. Iordanova, M. Mancheva, D. Klissurski, *Chem. Sustain. Development* **13**, 185-189, (2005).
15. S. Tepavitcharova, Chr. Balarew, F. Rull, D. Rabadjieva, A. Iliev, *J. Raman Spectrosc.* **36**, 981-987, (2005).
16. V. Z. Vassileva, P. P. Petrova, *Croat. Chem. Acta* Vol. **78**, 292-295, (2005)
17. I. Kostova, N. Trendafilova, G. Momekov, *JIB* **99**, 477-487, (2005).
18. I. Kostova, R. Kostova, G. Momekov, N. Trendafilova, M. Karaivanova, *J. Trace Elements Medicine Biology* **18**, 219-226, (2005).
19. I. Kostova, N. Trendafilova, Tz. Mihaylov, *Chem. Phys.* **314**, 73-84, (2005).
20. N. Trendafilova and Tz. Mihaylov, *Internet Electr. J. Molec. Design* **4**, 591-602, (2005).
21. I. Georgieva, N. Trendafilova, L. Rodriguez-Santiago, M. Sodupe, *J. Phys. Chem. A* **109**, 5668-5676, (2005).
22. I. Georgieva, N. Trendafilova, A. Aquino, H. Lischka, *J. Phys. Chem. A* **109**, 11860-11869, (2005).
23. M. Atanasov, C. Daul, H.U. Güdel, T. Wesolowski and M. Zbiri, *Inorg. Chem.* **44**, 2954-2963, (2005).
24. M. Atanasov and D. Reinen, *Inorg. Chem.* **44**, 5092-5103, (2005).
25. M. Atanasov, C.A. Daul and E. Penka Fowe, *Monatshefte Chem.* **136**, 925-963, (2005).
26. M. Atanasov and C.A. Daul, *Chimia* **59**, 504-510, (2005).

27. M. Atanasov, C. Daul and H.U. Güdel, *Comp. Chem.: Reviews Current Trends* **9**, 153-194, (2005).
28. M. Atanasov and C.A. Daul, *Compt. Rend. Chimie* **8**, 1421-1433, (2005).
29. N.S. Faradzhev, K.L.Kostov, P. Feulner, T.E. Madey, D.Menzel, *Chem. Phys.Lett.* **415**, 165-171, (2005).
30. P. Feulner, M. Ecker, P. Jakob, R. Romberg, R. Weimar, D.Menzel, A. Foehlich, W. Wurth, S.-H. Yang, C.S. Fadley, R.Larcpitrete, S.Lizzit, K.L.Kostov, G.Tyuliev, *Phys. Review B* **71**, N125409 (1-8), (2005).
31. I. Koseva, J.-P. Chaminade, P. Gravereau, S. Pechev, P. Peshev and J. Etourneau, *J. Alloys Comp.* **389**, 47- 54, (2005).
32. D. Binev, V. Nikolov and P. Peshev, *J. Alloys Comp.* **391**, 256 – 261, (2005).
33. D. Binev, V. Nikolov and P. Peshev, *J. Alloys Comp.* **393**, 287 – 391, (2005).
34. E. Grigorova, M. Khristov, M. Khrussanova, J.-L. Bobet and P. Peshev, *Int. J. Hydrogen Energy* **30**, 1099 – 1105, (2005).
35. A. Mihaylova, A. Tsanev, P. Stefanov, D. Stoychev, Ts. Marinova, *React. Kinet. Catal. Lett.*, **84**, 121-127, (2005).
36. L. Kolaklieva, R. Kakanakov, Ts. Marinova, G. Lepoeva, *Mater. Sci. Forum* **483-485**, 749-752, (2005).
37. P. Stefanov, I. Avramova, D. Stoichev, N. Radic, B. Grbic, Ts. Marinova, *Appl. Surf. Sci.* **245**, 65 – 72, (2005).
38. T. G. Vladkova, I. L. Keranov, P. D. Dineff, S. Y. Youroukov, I. A. Avramova, G. P. Altankov, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **236**, 552-562, (2005).
39. I. Avramova, P. Stefanov, D. Nicolova, D. Stoychev and Ts. Marinova, *Composites Sci. Techn.* **65**, 1663-1667, (2005).
40. B. Grbić, N. Radić, P. Stefanov, D. Stoychev and Ts. Marinova, *Appl. Catalysis B: Environmental* **64**, 51–56, (2005).
41. S. Petrovic., L. Karanovic, P. Stefanov, M. Zdujic, A. Terlecki-Baricevic, *Appl. Catalysis B: Environmental* **58**, 133–141, (2005).
42. N. Boshkov, K. Petrov, D. Kovacheva, S. Vitkova, S. Nemska, *Electrochim. Acta* **51**, 77-84, (2005).
43. L. Pascual, H. Gadjov, D. Kovacheva, K. Petrov, P. Herrero, J.M. Amarilla, R. M. Rojas and J. M. Rojo, *J. Electrochem. Soc.*, **152**, A301-A306, (2005).
44. K. Petrov, R. M. Rojas, P. J. Alonso, J. M. Amarilla, M. G. Lazarraga and J. M. Rojo, *Solid State Sci.* **7**, 277-286 (2005).

45. N. Boshkov, K. Petrov, S. Vitkova, G. Rajchevsky, *Surface & Coatings Techn.* **194**, 276-282, (2005).
46. D Tzankov, D Kovacheva, K Krezhov, R Puzniak, A Wisiniewski, E Svab and M Mikhov, *J. Phys. Condens. Matter* **17**, 4319-4332, (2005).
47. S. Armyanov, E. Valova, A. Franquet, J. Dille, J.L. Delplancke, A. Hubin, O. Steenhaut, D. Kovacheva, D. Tatchev, Ts. Vassilev, *J. Electrochem. Soc* **152**, C612-C619, (2005).
48. D. Kovacheva, B. Markovsky, G. Salitra, Y. Talyosef, M. Gorova, E. Levi, M. Riboch, H.-J. Kim, D. Aurbach, *Electrochim. Acta* **50**, 5553-5560, (2005).
49. K. Krezhov, D. Kovacheva, E. Svab, F. Bouree, *J. Phys. Condens. Matter.* **17**, S3139-S3147, (2005).
50. V. Mavrodinova, M. Popova, V. Valchev, R. Nickolov, Ch. Minchev, *J. Colloid Interface Sci.*, **286**, 268-273, (2005).
51. M. Neshkova, V. Nikolova, A.M. Bond, V. Petrov, *Electrochim. Acta* **50**, 5606-5615, (2005).
52. I. Spasova, P. Nikolov, D. Mehandjiev, *J. Coll. Interface Sci.* **290**, 343-349, (2005).
53. T. Tsoncheva, Sv. Vankova, O. Bozhkov, D. Mehandjiev, *J. Mol. Cat. A*, **225**, 245-251, (2005).
54. B. Donkova, D. Mehandjiev, *J. Mater. Sci.*, **40**, 3881-3886, (2005).
55. V. Getova, R. Bontchev, D. Mehandjiev, V. Skumryev, P. Bontchev, *Polyhedron* **24**, 1983-1990, (2005).
56. V. Barisic, F. Klingstedt, A. Naydenov, P. Stefanov, P. Kilpinen, M. Hupa, *Catal. Today* **100**, 337 – 342, (2005).
57. D. Stoilova, M. Georgiev, D. Marinova, *J. Mol. Struct.* **738**, 211-215, (2005).
58. D. Stoilova, M. Georgiev, D. Marinova, *Vibr. Spectrosc.* **39**, 46-49, (2005).
59. M. Georgiev, D. Stoilova, M. Wildner, V. Karadjova, *J. Mol. Struct.* **752**, 158-165, (2005).
60. M. Georgiev, M. Wildner, D. Stoilova, V. Karadjova, *J. Mol. Struct.* **753**, 104-112, (2005).
61. V. Koleva, *Croat. Chem. Acta* **78**, 581-591, (2005).
62. V. Koleva, *Spectrochim. Acta* **A62**, 1196-1202, (2005).
63. D. D. Stoyanova, D. Ch. Vladov, N. A. Kasabova, D. Mehandjiev, *Kinet. Catal.* **46**, 609 – 612, (2005).
64. E. Shinova, E. Zhecheva, R. Stoyanova, G. Bromiley, *J. Solid State Chem.* **178**, 1661-1669, (2005).
65. E. Zhecheva, R. Stoyanova, *Solid State Commun.* **135**, 405-410, (2005).

66. E. Shinova, E. Zhecheva, R. Stoyanova, G.D. Bromiley, R. Alcántara and J.L. Tirado, *J. Solid State Chem.* **178**, 2692-2700, (2005).
67. T. Berger, M. Sterrer, O. Diwald, E. Knözinger, D. Panayotov, T. L. Thompson, and J. T. Yates Jr., *J. Phys. Chem. B* **109**, 6061-6068, (2005).
68. D.A. Panayotov, J.T. Yates Jr., *Chem. Phys. Lett.* **410**, 11–17, (2005).
69. T. Zubkov, D. Stahl, T. L. Thompson, D. Panayotov, O. Diwald, and J. T. Yates, Jr., *J. Phys. Chem. B* **109**, 15454-15462, (2005).
70. D.D. Radev, M. Marinov, V. Tumbalev, I. Radev, L. Konstantinov, *Physica C*, **418**, 53-58, (2005)
71. K. Kalaydjiev, V. Lovchinov, D. Dimitrov, D.D. Radev, M. Marinov, V. Tumbalev, Ph. Vanderbemden, *J. of Optoelectronics Adv. Mat.* **7**, 423-426, (2005).

2.1.1.2. приети за печат през 2005 г. с документ за приемане от издателя:

1. G. Gentscheva, P. Tzvetkova, P. Vassileva, L. Lakov, O. Peshev, E. Ivanova, *Microchim. Acta*
2. B. Dimitrova-Koleva, K. Benkhedda, E. Ivanova, F. Adams, *Talanta*
3. E. Ivanova, K. Hadjiivanov, S. Dzwigaj and M. Che, *Microporous Mesoporous Mater.*
4. Tz. Venkov, K. Fajerweg, L. Delannoy, Hr. Klimev, K. Hadjiivanov and C. Louis, *Appl. Catal. A*
5. Tz. Venkov, Hr. Klimev, M.A. Centeno, J.A. Odriozola and K. Hadjiivanov, *Catal. Commun.*
6. M. Mihaylov, A. Penkova, K. Hadjiivanov and M. Daturi, *J. Mol. Catal. A*
7. D. Klissurski, M. Mancheva, R. Iordanova, G. Tyuliev, B. Kunev, *J. Alloys Comp.*
8. S. Uzunova, I. Uzunov, D. Kovacheva, A. Momchilov, B. Puresheva, *J. Appl. Electrochem.*
9. V. Bojinov, D. Simeonov, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*
10. B. З. Василева, П. П. Петрова, *Ж. Неорг. химии.*
11. I. Georgieva, N. Trendafilova, *Chem. Phys.*
12. I. Georgieva, N. Trendafilova, G. Bauer, *Spectrochim. Acta.*
13. T. Mihaylov, I. Georgieva, G. Bauer, I. Kostova, I. Manolov and N. Trendafilova, *Intern. J. Quant. Chem.*
14. I. Georgieva, I. Kostova, N. Trendafilova, V. K. Rastogi, G. Bauer, W. Kiefer, *J. Raman Spectr.*
15. N. Trendafilova, I. Kostova, V. K. Rastogi, I. Georgieva, G. Bauer, W. Kiefer, *J. Raman Spectr.*
16. M. Atanasov, P. Comba, Y.D. Lampeka, G. Linti, T. Malcherek, R. Miletich, A.I. Prikhod'ko and H. Pritzkow, *Chem. Eur. J*
17. D. Reinen, M. Atanasov and W. Massa, *Z. Anorg. Allg. Chemie.*

18. M. Atanasov, P. Comba, B. Martin, G. Rajaraman, H. Rohwer, *J. Comput. Chem.*
19. P. Stefanov, N. Minkovski, I. Balchev, I. Avramova, N. Sabotinov, Ts. Marinova, *Appl. Surf. Sci.*
20. D. Nikolova, E. Stoyanova, D. Stoychev, P. Stefanov and Ts. Marinova, *Surf. Coat. Techn.*
21. T. Vladkova, P. Dineff, D. Gospodinova, I. Avramova, *J. Appl. Polym. Sci.*
22. E. Stoyanova D. Nikolova, , D. Stoychev, P. Stefanov and Ts. Marinova, *Corrosion Sci*
23. I. Balchev, N. Minkovski, Ts. Marinova, M. Shipochka and N. Sabotinov, *Mat. Sci. Eng. B*
24. I. Avramova, D. Stoychev and Ts. Marinova, *Appl. Surf. Sci.*
25. Ts. Marinova, A. Tsanev and D. Stoychev, *Mater. Sci. Eng. B.*
26. N. Boshkov, K. Petrov, *Galvanotechnik*
27. R. M. Rojas, J. M. Amarilla L. Pascual, J. M. Rojo, D. Kovacheva, K. Petrov, *J. Power Sources*
28. T. Trendafilova, D. Kovacheva, K. Petrov, A. Hewat, *Z. Kristallog.*
29. M. Neshkova, E. Pancheva, V. Pashova, *Sensors & Actuators B.*
30. M. Neshkova, V. Nikolova, V. Petrov, *Anal. Chim. Acta.*
31. P. Konova, K. Arve, F. Klingstedt, A. Naydenov, N. Kumar, D. Yu. Murzin, *Appl. Catal. B.*
32. V. Idakiev, T. Tabakova, A. Naydenov, Z.-Y. Yuan, B.-L. Su, *Appl. Catal. A: General.*: 34. V. Koleva, M. Mehandjiev, *Mat. Res. Bull.*
35. E. Zhecheva, M. Mladenov, R. Stoyanova, S. Vassilev, *J. Power Sources.*
36. R. Stoyanova, E. Zhecheva and S. Vassilev, *J. Solid State Chem.*
37. R. Stoyanova, E. Zhecheva, R. Alcántara and J.L. Tirado, *J. Mater. Chem.*
38. E. Zhecheva, R. Stoyanova, R. Alcántara, P. Lavela, J.-L. Tirado, *J. Power Sources*
39. M. Beshkova, Z. Zakhariyev, M.V. Abrashev, J. Burch, R. Yakimova, *Mat. Sci. Eng B*
40. Z. Zachariyev, D. Ralovski, Pl. Zokov, M. Beshkova, *Mat. Sci. Eng. B*
41. J.-L. Bobet, E. Grigorova, B. Chevalier, M. Khrussanova and P. Peshev, *Intermetallics*
42. E. Grigorova, M. Khristov, M. Khrusanova and P. Peshev, *J. Alloys Comp.*
43. P. Peshev, S. Pechev, V. Nikolov, P. Gravereau, J.-P. Chaminade, D. Binev and D. Ivanova, *J. Solid State Chem.*

2.1.2. в България

2.1.2.1. излезли от печат през 2005 г.

1. G. Gentscheva, J. Jordanov, E. Ivanova, V. Petrova, L. Vladeva, *Bulg. Chem. Commun.* **37**, 69-72, (2005)
2. N. Velitchkova, N. Daskalova, E. N. Pentcheva, *Ann. Univ. Sofia, Fac. Chimie* **97**, 173-193, (2005)
3. Y. Dimitriev, A. Batchvarova, R. Iordanova, *J. Univ. Chem. Techn. Metall.* **40**, 29-32, (2005).
4. M. Mancheva, R. Iordanova, D. Klissurski, B. Kunev, *Compt. rend. l'Acad. bulg. Sci.* **58**, 1277-1280, (2005).
5. D. Klissurski, R. Iordanova, M. Mancheva, B. Kunev, *Compt. rend. l'Acad. bulg. Sci.* **58**, 10, 1169-1172, (2005).
6. N. Minkova, D. Klissurski, R. Iordanova, P. Stefanov, V. Vasileva, M. Markova, K. Chakarova, *Compt. rend l'Acad bulg. Sci.* **58**, 1273-1276, (2005).
7. A. Bachvarova-Nedelcheva, R. Iordanova, Y. Dimitriev, *J. Univ. Chem. Techn. Metall.* **40**, 315-318, (2005)
8. P. Stefanov, A. Mihaylova, D. Stoychev, B. Grbić, N. Radić, Ts. Marinova, *Compt. rend. Acad. bulg. Sci.* **58**, 1185-1188, (2005).
9. N. Minkova, D. Klissurski, R. Iordanova, P. Stefanov, V. Vasileva, M. Markova, K. Chakarova, *Compt. rend. Acad. bulg. Sci.* **58**, 1273-1276, (2005)
10. R. Nickolov, D. Mehandjiev, *J. Univ. Chem. Technol. Metall.* **40**, 81-92, (2005)
11. D. Stoilova, M. Georgiev, D. Marinova, *J. Univ. Chem. Technol. Metall.* **40**, 239-246, (2005)
12. D. Stoilova, M. Georgiev, D. Marinova, *Compt. rend. Acad. Bulg. Sci.* **58**, 1043-1048, (2005)
13. П.Р. Бончев, *Химия* **14**, 215 – 220, (2005).

2.1.2.2. приети за печат през 2005 г. :

1. P. Simeonova, D. Simeonov, N. Abadzhieva, V. Simeonov, *Ann. Univ. Sofia, Fac. Chimie.*
2. T. Todorov, D. Rabadjieva, St. Terapavitcharova, *J. Univ. Chem. Techn. Metall.*
3. G. N. Stefanov, D. Ch. Danailov, G. V. Avdeev, *Bulg. Chem. Commun.*
4. R. Nickolov, H. Klimev, D. Mehandjiev, *Bulg. Chem. Commun.*
5. М. Бешкова, З. Захариев, М. Абрашев, Дж. Бърч, Р. Якимова, *Електротехника и Електроника*

2.2. Научни публикации в пълен текст в сборници от конгреси и конференции, както и в тематични сборници

2.2.1. в чужбина

2.2.1.1. излезли от печат през 2005 г.:

1. S. Tepavitcharova, T. Todorov, D. Rabadjieva, M. Dassenakis, V. Paraskevopoulou, Proceeding of the 5th International Symposium on Trace Elements in Human: New Perspectives, October, 13 – 15, 2005, Athens, Greece, p.766-775.
"Modeling of Inorganic Chemical Species of Trace Elements in the River– Estuary–Sea Water System",
2. M. Gabrashanska, N. Tsocheva-Gaytandzhieva, S. Tepavitcharova, S. Ermidou-Pollet, S. Pollet, M. Galvez Morros, Proceeding of the 5th International Symposium on Trace Elements in Human: New Perspectives, October, 13 – 15, 2005, Athens, Greece, p.466-472.
"Status of an Antioxidant System in Fasciola Hepatica Infected Rabbits after Treatment with Triple Basic Salts",
3. M. Gabrashanska, N. Tsocheva-Gaytandzhieva, S. Tepavitcharova, S. Pollet, S. Ermidou-Pollet, M. Galvez Morros, Proceeding of the 5th International Symposium on Trace Elements in Human: New Perspectives, October, 13 – 15, 2005, Athens, Greece, p. 369-376.
"Comparative Aspects of Antioxidant Status in Ascaridia Galli Infected Chicks Treated with Double and Triple Basic Salts",
4. S. Tepavitcharova, T. Todorov, D. Rabadjieva, M. Dassenakis, V. Paraskevopoulou, CD-ROM of the Proceeding of the International Conference on New Water Culture, October 21 -23, 2005, Athens, Greece.
"Inorganic Pollution in the Systems Ropotamo/Kamchiya River – Estuary – Black Sea Waters",
5. E. Grigorova, M. Khristov, M. Khrussanova and P. Peshev, CD-ROM of the Proceedings of International Hydrogen Energy Congress IHEC 2005, Istanbul, Turkey, 13-15 July 2005.
"Hydrogen sorption properties of 85% Mg₂Ni – 10% V – 5% Ti nanocomposiete obtained by ball milling",
6. P. Stefanov, A. Mihaylova, D. Stoychev, B. Grbić, N. Radić, Ts. Marinova, Proceedings of 6th International Workshop of Catalytic Combustion, 11-14 September 2005, isle of Ischia, Italy, pp.69-79.
"Application of electrochemically deposited alumina films as catalys support",
7. B. Grbić, N. Radić, P. Stefanov, D. Stoychev and Ts. Marinova, Proceedings of 6th International Workshop of Catalytic Combustion, 11-14 September 2005, isle of Ischia, Italy, pp.299-303.
"Influence of manganese oxide on the activity of Pt/Al₂O₃ catalysts for combustion of n-hexane"

8. B. Grbić, N. Radić, Br. Marcović, Ts. Marinova, P. Stefanov, D. Stoychev, Savetovane Srpskog Hemijskog Društva, Beograd 2005, pp.24-26.

“Oksidacija n-heksana na tankoslojnim Pt i Cu-Co oksidnim katalizatorima na cirkonijum/čeličnim nosačima”

2.2.1.2. приети за печат през 2005 г. с документ за приемане от издателя:

1. H. Mikosch, E. L. Uzunova, G. St. Nikolov, In: 21th Austin Symposium on Molecular Structure, The University of Texas at Austin, March 2006

“DFT Study of Zeolites: From the Cluster Approach to Periodic Boundary Conditions”

2.2.2. в България:

2.2.2.1. излезли от печат през 2005 г.:

1. H. Vasilchina, S. Uzunova, A. Momchilov, I. Uzunov, D. Kovacheva, T. Stankulov Nanoscience and Nanotechnology - 5, eds. E. Balabanova, I. Dragieva, Heron Press, Sofia, 2005, p. 193-195.

“Synthesis and electrochemical behaviour of nanocrystalline α -Fe₂O₃ as anode for lithium batteries”

2. D. Klissurski, M. Mancheva, R. Iordanova, B. Kunev, Nanoscience and Nanotechnology - 5, eds. E. Balabanova, I. Dragieva, Heron Press, Sofia, 2005 p. 203-205.

“Synthesis of nano-crystalline α - and β -NiMoO₄ from mechanically activated precursors”

3. M. Mancheva, R. Iordanova, Y. Dimitriev, D. Klissurski, I. Uzunov, Nanoscience and Nanotechnology - 5, 2005, p. 123-125.

“Preparation of nano-crystalline MoO₃ by chemical methods”

4. R. Nathaniel, T. Mineva, K.L. Kostov and W. Widdra, Nanoscience and Nanotechnology - 5, 2005, p.20-22.

“Geometrical and vibrational features of adsorbed acetylene on Si(100)-(2x1)”

6. Ts. Marinova, R. Kakanakov, L. Kolaklieva, Proceedings of International Workshop NANO HARD 2005 October 19-21, 2005, Plovdiv, Bulgaria., pp.69-76

“Formation and Characterization of Metal/SiC Interfaces and Nanostructured Thin Oxide Films”

7. У. Колб, Д. Нихтянова, Дж. Ли, Д. Ковачева, И. Николов, В. Николов, Юбилеен сборник 10 години Централна лаборатория по минералогия и кристалография „Акад. Иван Костов” към БАН, София, 2005, стр.185-188.

”Изследване на кристалната структура на монокристали от NaAl(WO₄)₂”

8. D.D. Radev, M. Marinov, V. Tumbalev, S. Vasilev, Nanoscience and Nanotechnology - 5, eds. E. Balabanova, I. Dragieva, Heron Press, Sofia, 2005, p.78-79.

“Nickel-Titanium Nanostructured Shape Memory Alloys”

2.2.2.2. приети за печат през 2005 г. с документ за приемане от издателя:

1. I. O. Bozhkov, Ch. Tsvetkova, E. Russeva, Proceedings of FMNS 2005, 8-11 June, Blagoevgrad, Bulgaria
"Test methods for monitoring of traces of Pb, Bi, Cd, and Cu in Black Sea Lye",
2. N. Daskalova, P. Petrova, I. Havezov, S. Velichkov, Proceedings of FMNS 2005, 8-11 June, Blagoevgrad, Bulgaria
"Analysis of used catalytical converters"
3. Й. Пеловски, И. Хавезов, Доклади на научно-практическата конференция по управление в извънредни ситуации и защита на населението, ноември 2005, Изд. БАН
"Актуални проблеми на химическата защита при преработката, приложението и съхранението на опасни химически вещества",
4. P. Petrova, N. Velitchkova, I. Havezov, N. Daskalova, International scientific conference, 8-11. 06. 2005, Blagoevgrad, Bulgaria
"Determination of Platinum, Palladium, Rhodium, Barium and Lead in Automotive Catalytic Converters by Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry (ICP-AES)"
5. X. Василчина, С. Узунова, Т. Станкулов, И. Узунов, Б. Пурешева, Сборник трудове на Първа Балканска конференция на младите учени, 16-18.06.2005, Пловдив
"Влияние на метода на синтез върху електрохимичното поведение на α -Fe₂O₃ аноди за литиево-йонни батерии",
6. Т. Станкулов, С. Узунова, X. Василчина, Д. Ковачева, И. Узунов, Сборник трудове на Първа Балканска конференция на младите учени, 16-18.06.2005, Пловдив
"Механизъм на електрохимичното литиране на α -Fe₂O₃ аноди за литиево-йонни акумулатори"
7. H. Vasilchina, S. Uzunova, T. Stankulov, A. Momchilov, I. Uzunov, B. Puresheva, Functional Properties of Nanostructured Materials, 3-14 June 2005, Sozopol, Bulgaria
"Electrochemical behaviour of nanocrystalline α -Fe₂O₃ anode material for lithium batteries"
8. T. Todorov, D. Rabadjieva, S. Tepavitcharova, M. Dassenakis, V. Paraskevopoulou, G. Shtereva, A. Krastev, Proceeding of the International Scientific Conference FMNS-2005, 8-11. 06.2005, Blagoevgrad, Bulgaria
"Investigation and Simulation of Chemical Species of Ropotamo and Kamchiya River Waters",
9. O. Bozhkov, Chr. Tzvetkova, E. Russeva, Proceeding of the International Scientific Conference FMNS-2005, 8-11. 06.2005, Blagoevgrad, Bulgaria
"Test Methods for Monitoring of Traces of Pb, Bi, Cd, and Cu in Black Sea Lye",

2.3. Издадени през 2005 г. научни книги: няма

2.4. Издадени през 2005г. учебници и печатни научни пособия: няма

2.5. Научно-популярни и публицистични издания, отпечатани през 2005 г.:

2.5.1. книги и брошури - няма

2.5.2. статии

1. Д. Клисурски - 11 бр. публицистични и дискуссионни статии в периодичния печат
2. Хр. Баларев, “Някои проблеми от научното творчество на проф. Д. Баларев”, в сборник “120 г. от рождението на проф. Д. Баларев”, стр. 27-52, Издателство Фалкор консулт, София, 2005

*Главен редактор ст.н.с. II ст. д-р Пламен Стефанов;
редактор Геновева Атанасова.*

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