

ОТЧЕТЕН ДОКЛАД

на

ИНСТИТУТА ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

за 2017 г.

Директор на ИОНХ:
/проф. д-р Пламен Стефанов/

януари 2018 г.

1. Проблематика на ИОНХ

1.1. Преглед на изпълнението на целите на ИОНХ.

Стратегическата цел на ИОНХ е превръщането на Института в национален изследователски и иновационен център в областта на химия на материалите и процесите с екологична насоченост. Тази цел е тясно свързана с актуалните обществени предизвикателства в частта за опазване на околната среда, за подобряване на енергийна ефективност и за ефективно оползотворяване на природни ресурси. За постигане на стратегическата цел са поставени няколко оперативни задачи, чието изпълнение през 2017 г. е както следва:

А. Научно-изследователски програма. В съответствие с тематичните области на ИСИС 2014-2030 г, научно-изследователският план на ИОНХ бе актуализиран през 2017 г. с цел да се насочат и концентрират научните изследвания в следните приоритетни теми:

- ✓ *Материали за екоенергийни, оптични и биомедицински технологии;*
- ✓ *Материали и процеси за опазване на околната среда и борба с климатичните промени;*
- ✓ *Оползотворяване на природни ресурси и екологичен мониторинг;*
- ✓ *Нови подходи за инструментален и теоретичен анализ на материали.*

Изследванията по тези теми се провеждаха в рамките на общо **32 проекта** с различни източници на финансиране като 7 РП на ЕС, ФНИ, МОН, чуждестранна фирма, вътрешно-институционален договор и по междуакадемични спогодби-БАН. Резултатите от изследванията са отразени в общо **105 научни публикации**, от които **85 труда са с импакт-фактор или импакт-ранг**, и са представени на общо **34 научни форума у нас и в чужбина** под формата на **94** постерни и устни доклади. Върху научните трудове на учени от ИОНХ са забелязани общо **2064 цитирания**, което е указание международна разпознаваемост на научната продукция. ИОНХ поддържа интензивно международно сътрудничество, израз на което са **42 съвместни научни публикации с чуждестранни учени** от водещи научни организации.

Б. Обучение на докторанти и млади учени. През 2017 г. в ИОНХ са обучавани **8 докторанти** по научно направление „Химически науки”, а други **4-ма докторанти** успешно защитиха дисертационните си трудове. През годината млад учен от ИОНХ бе отличен с диплом „**Отличен проект**” по **Програма на БАН** за подпомагане на младите учени, направление „Нанонауки, нови материали и технологии”.

В. Участие в ОП-НОИР. Усилията на ИОНХ през годината бяха насочени към **подготовката на два мащабни институтски проекта** за създаване на:

- ✓ Център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии”, **където ИОНХ е координатор**
- ✓ Център по компетентност, тема „Батерии и суперкондензатори” ХИТМОБИЛ, **където ИОНХ е партньор.**

Независима оценка на дейността на ИОНХ бе дадена от Комисията за наблюдение и оценка на научноизследователската дейност, осъществявана от висшите училища и научните организации в периода октомври 2016 - януари 2017 г.. Според доклада на Комисията ИОНХ е класиран на първо място в група „елит” със 102.95 т. в областта на Химическа науки и технологии.

В заключение, постигнатите резултати през 2017 г. са добра основа за устойчиво развитие на ИОНХ в областта на химия на материалите и са в съответствие с принципите на Националната Стратегия за провеждане на качествени фундаментални изследвания и за развитие на специалисти в научната област „3. Природни науки, математика и информатика”, научно направление „Химически науки”.

1.2. Изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017-2030 - Извършени дейности и постигнати резултати по конкретните приоритети. През 2017 година продължиха дейностите на ИОНХ за изграждане на благоприятна среда за научна дейност, както следва:

А. Научна инфраструктура: Дейностите включват поддържане и развитие на изградената **институтска инфраструктура ИнфраИОНХ** в приоритетни области на чистите технологии и технологии свързани със здравословен живот (<http://infraionh.igic.bas.bg/>). Институтската инфраструктура е **достъпна за външни ползватели по заявка.**

ИОНХ участва активно в изграждането, планирането и функционирането на две национални научни инфраструктури, включени в националната пътна карта и диагностицирани от МОН през 2017 г.:

✓ **ИНФРАМАТ** „Разпределена инфраструктура от центрове за производство и изследване на нови материали и техните приложения, както и за консервация, достъп и е-съхранение на артефакти (археологически и фолклорни) „<http://ipc.bas.bg/page/bg/dogovori/obschoinstitutiski-infrastrukturni-proekti/proekti/inframat.php>

✓ **СЕВЕ-ECCSEL** «Съхранение на енергия и водородна енергетика».

Б. Научен персонал: Развитието и поддържането на висококвалифицирани и мотивирани изследователи, както и търсене на механизми стимулиращи конкуренцията и научните резултати са следващите цели на ИОНХ. През 2017 г се проведе Атестация на служителите на ИОНХ за оценка на 3-годишната им дейност, която да послужи като база за потенциално диференцирано заплащане.

Учените от ИОНХ поддържат добро ниво на мобилност, като през 2017 година са осъществени 26 командировки за участие в научни форуми и работа по международни сътрудничества, което спомага за успешно интегриране в европейското изследователско пространство. Реализирани са 2 стипендии за научен обмен по Еразъм, една постдокторска стипендия и 1 грант за участие в 67-ма среща на млади учени с Нобеловите лауреати в Линдау, Германия. В същото време 8 чуждестранни учени от Чешка Република и Косово са гостували в ИОНХ. С цялостната си научноизследователска дейност ИОНХ се стреми да интегрира науката в България в Европейското изследователско и университетско пространство в изпълнение на НСРНИ 2020.

Всички тези дейности имат за цел да се концентрира научната инфраструктура и изследователския капацитет на ИОНХ в значими за икономиката направления и за решаване на неотложно възникнали потребности.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности

А. Научно-приложна дейност. В резултат на наличните апаратури и обучени специалисти за работа с тях бяха изпълнени успешно научни и научно-приложни задачи по проекти в полза на обществото и бизнеса.

Също така, ползата за обществото от научно-приложните, иновационни и сервизни дейности на ИОНХ е пряко свързана с разработване на неорганични материали за безопасно съхранение на енергия, за интелигентни оптични и биомедицински приложения с цел да се постигнат нови знания и да се въведат оригинални подходи и концепции в една от приоритетните области на страната, дефинирана по ИСИС, а

именно „Чисти технологии с акцент върху транспорта и енергетиката”. По отношение на екологични предизвикателства дейността на ИОНХ включва разработването на нови катализатори за почистване на димни газове от битови отоплителни инсталации, като се цели и повишаване на тяхната енергийна ефективност чрез доизгаряне на въглеродния оксид и въгледородите в отпадните газове. Провежданите изследвания върху екологичното състояние на води и почви, както и оползотворяване на природни ресурси, допринасят за подобряване качеството на живот. В ИОНХ са разработени иновативни продукти и технологии на основата на химическите ресурси на Черно море, организирани са малки производства на натурална медицинска козметика, която се предлага в страната и чужбина. Повечето Спа-центрове в страната използват консултации и експертизи на „Лаборатория по солеви системи и природни ресурси“, което подпомага развитието на бизнеса им.

Извършването на сервизни анализи, консултации и експертизи за нуждите на фирми подпомагат развитието на бизнеса.

Б. Подготовка на висококвалифицирани специалисти. ИОНХ извършва обучение на съвременен ниво на докторанти, специализанти и млади учени в областта на химия на материалите. Също така, ИОНХ предоставя своята инфраструктура на студенти и докторанти от други научни организации за извършване на специализирана научна дейност. По този начин ИОНХ допринася за създаването на висококвалифицирани кадри, които са конкурентноспособни на пазара на труда и отговарят на нарастващите изисквания на съвременната икономика в България.

В. Популяризиране на научни резултати. През 2017 г. учени от ИОНХ са изнесли 3 лекции на обществени места - на семинар в Bilkent University, Анкара и пред ученици Националната природо-математическа гимназия. Млад учен от ИОНХ публикува научно-популярна статия в „ВВС знание“ и е дадено интервю за вестник „Аз Буки”.

1.4. Взаимоотношения с други институции

А. Научни институции в страната:

ИОНХ поддържа традиционни научни сътрудничества с

- Висши училища: като Софийския университет (ФХФ и ФзФ), ХМТУ - София, МУ – София (Факултет по дентална медицина) и Плевен, ТУ– София;
- Институти на БАН: като Институт по електроника, Институт по катализ, Институт по електрохимия и енергийни системи, Институт по органична химия с център по фитохимия, Институт по физикохимия, Институт по металознание, съоръжения и технологии „Акад. Ангел Балеvски” с Център по хидро- и аеродинамика, Институт по експериментална морфология, патология и антропология с музей;
- Селскостопанска академия, Институт по почвознание, агротехнологии и защита на растенията.

Действащите 15 съвместни проекта по ФНИ на ИОНХ с българските научни организации и многобройните съвместни публикации са доказателство за това сътрудничество.

Б. Участие в експертни органи. Учени от ИОНХ участват в общо **18 експертни органи и организации, повечето** в областта на науката и висшето образование. По-важните са: Постоянна комисия по природни науки, математика и информатика (ПКПНМИ) към НАОА, Временна Научно Експертна Комисия по Химически науки (МОН-ФНИ), Комитет за наблюдение на ОП „Наука и образование за интелигентен растеж“ (МОН), International Union of Crystallography (Commission on Powder Diffraction), Съвет за обществени консултации към Комисията по европейски въпроси и

контрол на европейски фондове в Народното събрание, Национален съвет за наука и иновации (МОН), Работна група за актуализация на Правилата за оценка на научните организации и висшите училища (МОН), Работна група „Външна независима оценка на научно-изследователската дейност извършвана от висшите училища и научни организации, Международен съюз за чиста и приложна химия (IUPAC) и др. Може да се отбележи, че учен от ИОНХ е участвал Работна група за изготвяне, популяризиране и приемане на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2020 г. – документ, който ще определя развитието на науката в България през следващите години.

Учен от ИОНХ е извършил експертиза за Оценка на Лаборатория за изпитване към българска служба за акредитация (БСА).

В. Рецензии и становища по процедури. Изготвени са **25** рецензии и становища по процедури за образователно ниво, научни степени и академични длъжности към СУ, МУ, ХТМУ –София, ПУ „Паисий Хилендарски”, ИОНХ и други институти на БАН - ИФХ, ИК, ИМСТЦХА. През 2017 г са изготвени **38** анонимни рецензии по проекти на ФНИ и други научни организации и **95** анонимни рецензии на статии за специализирани списания.

Г. Международни мрежи и организации. Институтът е член на Европейския научен алианс по енергия (програма „Съхранение на енергия”, подпрограма „Електрохимично съхранение”).

Учени от ИОНХ са членове в:

- международни научни дружества - Royal Society of Chemistry, Academia Europea, American Chemical Society и Международен съюз за чиста и приложна химия,
- национални научни дружества - Българско кристалографско дружество, Клуб на българските катализици и съюз на химиците в България.

Учени от ИОНХ участва в:

- редакционните колегии на Current Physical Chemistry и Open Engineering
- организационни комитети на научни форуми.

1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата

1.5.1. Практически дейности: С наличното оборудване в ИОНХ са извършвани сервизни услуги и анализи за други институти на БАН (ИФХ, ИЕЕС, ИМК и ИИХ), български университети (НИС-ХТМУ, УХТ-Пловдив, ФХФ-СУ) и за външни заявители. За нуждите на бизнеса през 2017 г., ИОНХ са извършвани анализи за сертифициране на продукцията, контрол на суровини и технологични процеси, за фирмите Сенсата технолоджи ООД, Агрополихим ЕООД, Барит Майнинг ЕООД, 365 БГ ЕООД, Карбофит ООД, Вал Технолоджи ЕООД и др. Сключен е нов договор с българска фирма ГАРБ Оудиънс межърмънт България. В продължение на работата по екологична и термодинамична оценка на геоаккумуляцията и мобилността на преходни йони през 2017 година са изследвани повърхностни води и почви в металургично замърсения регион Кърджали. По-специално това са две природни зони (язовир "Кърджали" и язовир "Студен Кладенец") и две промишлено замърсени зони (до входа на ОКЦ – Кърджали и до хвостохранилище на «Горубсо»). Нивата на замърсяване на водите и почвите са оценени чрез физико-химични и химични анализи.

Във връзка с изследванията на ИОНХ върху устойчиво използване на морските ресурси в Института се разработват иновативни продукти и технологии и се организират малки производства на медицинска натурална козметика. Институтът продължава партньорството си с община Бургас и областна управа Бургас като рекламира уникалните солени езера чрез разработените козметични продукти и участва в различни техни инициативи. Проведени са 2 семинар-обучения в Ловеч и Плевен на

тема „Красота и здраве от българската природа“ за представяне на продуктите и програмите за Wellness и Spa. Учен на ИОНХ е член и участник в заседанията на Обществения съвет, гр. Бургас, за Атанасовско езеро.

1.5.2. Проекти, свързани с общонационални и оперативни дейности

През 2017 година продължи участието на ИОНХ в машабен междуинститутски проект на БАН с национално значение за изучаване на тракийското наследство „ТРАКИТЕ – генезис и развитие на етноса, културни идентичности, цивилизационни взаимодействия и наследство от древността”, по Тема 3 „Рудодобив, металургия и обработка на метала. Развитие на технологиите. Най-ранната металургия” и Тема 4 „Изследване на знакови технологии: мазилки, стенописи, пигменти” (финансиран от дарители). Получените резултати от проведените съвместни изследвания са обобщени в четири труда отпечатани през 2017 г в Сборник "Тракийската древност: технологични и генетични изследвания, история и нематериално наследство".

2. Резултати от научноизследователската дейност през 2017 г.

Основните резултати от научно-изследователската дейност на Института ще бъдат представени следвайки темите и задачите от научно-изследователския план на ИОНХ приет през 2017 г.

Тема А: Синтез, структура и дизайн на материали за екоенергийни, оптични и биомедицински технологии

Интеркалационни съединения и сложни оксиди като материали за литиево-йонни батерии; пост-литиево-йонни батерии и термоелектрични устройства

- Предложен е нов клас високо-волтови електродни материали за литиево- и натриево-йонни батерии на основата на двойни натриево-никелово-манганови сулфати. Изучен е механизма на интеркалация на алкални йони в тях и е показано, че в зависимост от съдържанието на никел и манган се извършва селективна интеркалация на натрий.
- На основата на интеркалационни свойства на натриево-никелово-манганови сулфати е предложено конструирането на нов тип електрохимична клетка, а именно хибридна литиево-натриево йонна клетка като алтернатива на индивидуалните литиеви- и натриеви представители. Функцията на клетката се дължи на протичането на конкуриращи се интеркалационни реакции между литиеви и натриеви йони, които лесно се контролират чрез вида на използвания електролит – литиев или натриев в неводна среда.
- В търсене на екологични и безопасни електродни материали е получена нова фаза на заместен с магнезий натриево-манганов фосфат с оливинова структура. Методът на синтез включва оригинална разработка чрез прилагане на структурно-насочващ магнезиево-манганов прекурсор. Чрез рентгеноструктурен анализ по метода на Ритвелд и ЕПР е определено необичайно катионно разпределение на магнезия в оливиновата структура.
- Разработена е нова екологична натриево-йонна клетка чрез комбинирането на високо-волтов слоест натриево никелово-манганов оксид като катод и ниско-волтов слоест натриево титанов оксид като анод в натриев електролит.
- Развит е оригинален подход за изучаване на структурните особености на металните слоеве при натриево-преходно метални оксиди с трислойно подреждане. Подходът се състои в комбинираното използване на магнитни резонансни методи:

електронен парамагнитен резонанс на Mn^{4+} йони и ядрено магнитен резонанс на ^{23}Na в твърдо състояние.

- Изследвано е влиянието на размера на частиците върху термоелектричните свойства на *p*- и *n*-тип оксидни полупроводници. Показано е, че размерът на частиците влияе основно върху електричната проводимост, докато коефициентът на Зеебек и термичната проводимост остават непроменени.
- Изучени са термоелектричните свойства на композити между кобалт съдържащи перовскити и слоеви кобалтови оксиди. Благодарение на синергичен ефект между отделните компоненти е постигнато значително подобряване на термоелектричната ефективност на композитните оксиди.
- Направен е сравнителен анализ на електрохимичното поведение на двата най-перспективни класа слоеви оксиди използвани като катодни материали в литиеви батерии а именно: клас оксиди богати на литий и манган описвани с обща формула $xLi_2MnO_3(1-x)Li[Ni_aCo_bMn_c]O_2$ ($a+b+c=1$) и клас оксиди богати на никел описвани с обща формула $LiNi_yCo_xMn_{1-y-x}O_2$. Установено е, че заместени катодни материали с Zr, Mg, Al притежават по-бърза електрохимична кинетика, много по-тънък повърхностен филм, както и по-ниско съпротивление при преноса на заряд.

Материали на основата на оксиди и хидроксиди за суперкондензаторни системи;

- Продължиха изследванията върху изясняване влиянието на вида на електролита върху електрохимичните характеристики на хибриден суперкондензатор на основата на композит от $\alpha-Ni(OH)_2 \cdot xH_2O$ и активен въглен. Чрез комбиниране на електрохимични и *ex-situ* рентгенографски, SEM и AFM изследвания е показано, че два процеса са отговорни за по-добрите капацитивни свойства и циклична стабилност на електрода в смесен LiOH-KOH електролит. Това са интеркалацията на Li^+ и водните молекули от електролита между никел-хидроксидните слоеве, което стабилизира слоестата структура при циклирането, както и процесите, водещи до заглаждане на повърхността на електродния материал, което осигурява по-хомогенен контакт с електролита.
- Изследванията на смесени наноразмерни шпинелни оксиди за използване в суперкондензаторни системи продължиха със синтезирането и охарактеризирането на наноразмерен $MnFe_2O_4$. Разпределението на размера на порите при $MnFe_2O_4$ е по-еднородно от това на $CoFe_2O_4$ и $NiFe_2O_4$ като мангановия ферит има най-висока специфична повърхност и най-голям обем на порите в сравнение с $CoFe_2O_4$ и $NiFe_2O_4$. Този резултат е в съгласие с установената висока специфична капацитивност и електрохимична ефективност на мангановия ферит.

Нанокompозитни материали за акумулиране на водород

- Въз основа на системните изследвания върху акумулирането на водород в композитни системи бе отличен активният въглен, получен от полиолефинов восък, като най-добра добавка към магнезий за подобряване на абсорбционно-десорбционните му характеристики.

Интелигентни оптични системи на основата на стъкла и керамики;

Изследванията са свързани със синтеза, структурното охарактеризиране и изучаване на луминесцентните свойства на оксидни стъкла и стъклокерамики за диодни материали и матрици за лазерно приложение.

- С цел разработване на материали, с потенциално приложение като пренастройваеми фемтосекундни лазери бяха получени дотирани с хром (Cr^{3+})

стъклокерамики в системата $\text{Li}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{LiBO}_2$. Спектрите на абсорбция и емисия показват едновременното присъствие на Cr^{3+} и Cr^{4+} йони, което ги прави подходящи за пренастройваеми твърдотелни лазери. Продължиха изследванията върху дотирани с хром (Cr^{3+}) волфраматни твърди разтвори $\text{Sc}_{2-x}\text{In}_x(\text{WO}_4)_3$ ($0 < x < 2$). Установено беше, че $\text{Sc}_2(\text{WO}_4)_3$ се характеризира с най-интензивна емисия и е най-подходящият състав за приложение като матрица за пренастройваеми лазери в областта 750 - 1050 nm.

➤ С цел получаване на диоди излъчващи различни цветове от видимата част на спектъра са синтезирани двойно дотирани с тербий и европий стъклокерамики. Анализът на абсорбционите и емисионни спектри показва пренос на енергия от тербиевия към европиевия йон, което дава възможност за контролиране на излъчвания цвят. Стъклокерамиката със съотношение $\text{Tb}^{3+}:\text{Eu}^{3+} = 0.33:0.033$ показва CIE координати много близки до белия цвят (0.332, 0.305).

➤ Продължиха структурните изследвания върху боро-бисмутатни стъкла съдържащи WO_3 , който е желан компонент за подобряване на оптичните свойства в „host“ матрици. Въз основа на Раман и инфрачервен спектрален анализ е установен близкия порядък и начин на свързване на структурните единици в получените стъкла.

➤ С цел изучаване на процесите на лазерно-индуцирано формиране на наночастици от благородни метали в прозрачни материали и изследване на техните оптични свойства е синтезирано силикатно стъкло с номинален състав $50\text{SiO}_2-20\text{Al}_2\text{O}_3-20\text{B}_2\text{O}_3-5\text{CaO}-2\text{Li}_2\text{O}-3\text{MgO}$ (wt.%), което бе дотирано с Au и Ag (0.01-2 wt.%). След селективно лазерно облъчване и термично отгряване са наблюдавани ясни промени в цвета на облъчените обеми в резултат на формирането на наночастици от злато или сребро.

➤ Установено е, че стъклокристалните образци от системата $\text{WO}_3-\text{ZnO}-\text{Nd}_2\text{O}_3-\text{Al}_2\text{O}_3$ притежават висока чувствителност като сензори за влага.

Нанокмпозитни фосфатни материали с биомедицинско приложение.

➤ Изучаването на връзката *синтез-структура-фазовогранични преходи - механични свойства - биологични свойства* на калциево-фосфатни биоматериали продължи през годината в следните насоки:

1) Получени са аморфни калциеви фосфати с висока специфична повърхност и порьозност, при синтеза им в среда от симулирана тъканна течност, модифицирана с органични молекули (глицин, аланин, ксантан гум и глицерин).

2) Проследени са измененията във фазовия състав, размера на кристалитите и вътрешната микроструктура на кристалните фази и аморфни вещества във всеки етап от механичното третиране на бифазни калциево фосфатни материали. Установена е различна анизотропия в някои кристалографски посоки при кристалите на хидроксиапатита.

3) Получени са две серии цименти - брушитни и нов тип натриево-калциево-фосфатни цименти. Установено е че вторите, имат по-кратки времена на втвърдяване и са по-стабилни при престой в симулирана тъканна течност. При двата типа е регистрирано зараждане на нова калциево-фосфатна фаза на повърхността им при престой в симулирана тъканна течност.

➤ Изследвани са корозионните потенциали при отворена електрична верига и е оценена корозионната устойчивост на четири групи опитни образци, получени от два вида неблагородни сплави за металокерамика на никелова (MARRANIUM CC) и кобалтова (MARRANIUM FI) основа, произведени по метода на праховата металургия, разработени в ИОНХ.-Установени са ниски стойности на корозионните потенциали на

образците от трета и четвърта група (леяк, съответно от кобалт-хромовата и никел-хромовата сплав) в кисела среда. Доказани са технологичните предимства на метода за производство на денталните сплави с възможност за повторно използване на остатъчната дентална сплав.

➤ Продължи изследването на равновесната и неравновесна кристализация в системите $\text{Gly-ZnX}_2\text{-H}_2\text{O}$ ($\text{X}=\text{Cl}^-, \text{Br}^-, \text{I}^-$), с цел получаване на нови съединения обединяващи свойствата на биологично активните цинкови йони и глицинови цвистерйони. Изолирани са три нови фази с различно съотношение на глицин и цинков бромид и е намерено, че при равновесни условия кристализират безводни съединения, докато при неравновесни условия - кристалохидрати с различен формулен тип.

➤ Продължено е изследването на спонтанната кристализация от преситени натриево-сулфатни и натриево-селенатни разтвори; Установено е, че $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ почти винаги кристализира преди $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ от техните преситени разтвори, докато кристализацията на $\text{Na}_2\text{SeO}_4 \cdot 7.5\text{H}_2\text{O}$ е по-скоро вероятностен процес.

➤ Чрез газопламъчен и електроискрово нанасяне са отложени многокомпонентни въглерод- и борсъдържащи вещества върху стоманени детайли с цел получаване на материали с подобрени свойства по отношение на абразивно износване

Тема Б: Материали и процеси за опазване на околната среда и борба с климатичните промени

Каталитични системи, кинетика и механизъм на каталитични реакции за очистване на емисии от отпадни газове, летливи органични вещества и азотни оксиди;

➤ Проведени са микрокалориметрични измервания на топлината на адсорбция на NO_2 върху $\text{Pt/BaO}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ катализатор за акумулиране и редукция на азотни оксиди (NO_x) с отчитане на влиянието на CO_2 . Установена и обяснена е зависимостта на топлината на адсорбция $\Delta H_{\text{ads}}(\text{NO}_2)$ от температура и концентрация от NO_2 . Микрокалориметричните данни показват, че CO_2 въздейства отрицателно върху процеса на NO_x адсорбция.

➤ Установена и обяснена е двойно по-високата специфична каталитична активност на меднооксидни катализатори, нанесени на мезоструктурирани алумо-въглеродни композити по отношение редукцията на NO с CO спрямо тази на меднооксидни катализатори, нанесени на неструктурирани композити.

➤ Съвместно с колеги от ИОХЦФ са изследвани активни въглени от отпадъчна биомаса (кайсиеви костилки и гроздови семки) като носители на медни и манганови оксиди в ролята на катализатори за разлагане на метанол. Установено е, че ниската повърхностна функционалност и по-високата степен на мезопорьозност на въглените, както и контролируемо съотношение Cu/Mn засилват каталитичната активност на материала.

➤ Получени са Cu-Ni оксидни катализатори чрез импрегниране на носител ($\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$) с воден разтвор на Cu и Ni нитрати при съотношение отговарящо на стехиометричния шпинел CuNi_2O_4 . Установени са нови фази от шпинелов тип при увеличаване на температурата, които променят каталитичната активност в реакцията на окисление на CO с кислород.

➤ Установено е, че азотен оксид се разлага директно върху катализатори от перовскитов тип с обща формула $\text{LaTi}_x\text{Mg}_y\text{Fe}_z\text{O}_3$ над 250°C и в отсъствие на

окислителни като почистването на азотния оксид в газови смеси достига до 80 %. В основата на това действие е формирането на каталитично активни комплекси на Fe^{3+} -йони на повърхността на катализаторите.

➤ Изследвани са каталитичните свойства и възможностите за приложение на серия паладий съдържащи перовскити (модифициран с паладий $CuWO_4$ и др.) за пълно окисление на наситени въглеводороди (C1 – C4) в отпадни газове. Установена е корелация между наблюдаваната активизиращата енергия и енергията на връзката C – H в съответния въглеводород.

➤ Синтезирани и охарактеризирани са катализатори с перовскитов тип структура $LaCoO_3$ и $YCoO_3$, нанесени върху носител $\alpha-Al_2O_3$. Каталитичната активност е изследвана по отношение на пълното окисление на въглеводороди (n-хексан и толуен). Установено е, че толуена се окислява по-лесно от n-хексана и пробата, съдържаща лантан, показва по-висока активност, отколкото съдържащата итрий. Реакционният механизъм е установен чрез експерименти по така нареченото деплетивно окисление.

➤ Разработват се каталитични монолитни елементи с цел приложение в почистване на димни газове от битови отоплителни инсталации, като се цели и повишаване на тяхната енергийна ефективност чрез доизгаряне на въглеродния оксид и въглеводородите в отпадните газове. Проведени са изследвания върху възможностите за получаване на нанесени катализатори върху метални монолитни носители базирани на сплав Fe-Cr-Al (т.е. утвърден в практиката промишлен носител VDM® Aluchrom Yhf, VDM Metals GmbH, фирма към Krupp Thyssen, Германия). Разработват се методи за устойчиво нанасяне на каталитично активна фаза под формата на многослойни системи, съдържащи оксиди на Al, La, Ce, Ti, Zr и Si и паладий съдържащи перовскити.

➤ Разработени са специфични експериментални подходи за изследване на нови и доказани в практиката индустриални катализатори, производство на фирмата Халдор Топсо (Дания). Изчислени са кинетичните параметри на реакциите на пълно окисление на органични вещества и въглероден оксид в условия, близки до съществуващите в практиката, включително за устойчивост на работа в присъствие на серен диоксид и високо съдържание на водни пари.

Оксидни тънки слоеве и нанопрахове за фотокаталитични приложения

➤ С метода спрей пиролиза са получени тънки филми от ZnO , TiO_2 и $ZnO-TiO_2$ за фотокаталитично разлагане на багрила при облъчване с UV или видима светлина. Установено е, че получените наноразмерни филми имат висока фотокаталитична активност в продължение на няколко цикъла, което ги прави подходящи за почистване на отпадни води, замърсени с реални текстилни багрила.

➤ Изследвани са фотокаталитичните свойства на слоеве от TiO_2 , нанесени върху слой от SnO_2 и отложени върху алуминиеви подложки чрез метода спрей пиролиза. Показан е ефектът на подслоя от SnO_2 за повишаване на фотокаталитична активност на системата SnO_2/TiO_2 за разграждане на текстилни багрила под действие на видима светлина.

➤ Наноразмерни прахове от калциев титанат ($CaTiO_3$) са синтезирани чрез механично активиране (МА) на хидротермално приготвени утайки и е установена по-висока им фотокаталитична активност при разлагане на малахитово зелено, отколкото тази за парацетамол. Намерено е, че активността нараства с увеличаване на времето за активиране.

➤ С цел получаване на образци притежаващи фотокаталитични свойства е изследвана тенденцията към кристализация на гели от бинарните системи $\text{TiO}_2\text{-M}_n\text{O}_m$ ($\text{M}_n\text{O}_m = \text{TeO}_2, \text{SeO}_2, \text{V}_2\text{O}_5, \text{ZnO}$). Установено е, че присъствието на селен или бор стимулира кристализацията на TiO_2 (анатаз) при 300°C , докато в присъствие на телур или цинк кристализацията започва при по-висока температура (500°C). Получени са нанокompatитни прахове, които до 300°C съдържат предимно аморфна фаза, а над 400°C – смес от няколко кристални фази (анатаз, $\alpha\text{-TeO}_2$, TiTe_3O_8 , ZnTiO_3 и рутил).

➤ Продължиха изследванията свързани с механохимично активиран твърдофазен синтез на неорганични оксидни фази с волфраматна структура. Изучено е влиянието на експерименталните условия на механохимично активиране върху: процесите на аморфизиране, времето на синтез, размера на кристалитите, оптичните и каталитични свойства на CaWO_4 . Полученият наноструктуриран CaWO_4 показва добри фотокаталитични свойства при разграждане на органичното багрило Малахитово зелено.

➤ Чрез зол гел метода са получени тънки покрития от дотиран с Nd титанов диоксид върху стоманена основа за подобряване на корозионната устойчивост. Показано е, че най-висока корозионна стабилност имат покритията получени от титанов буюксид, дотирани с неодим, за които се регистрира нулева загуба в теглото след 200 часа престой в корозионна среда от NaCl.

➤ С метода спрей пиролиза върху въглеродна стомана са нанесени покрития от дотиран с церий TiO_2 . Доказано е, че увеличаването на съдържанието на допанта до 5 ат% води до формиране на гладка повърхност с малко дефекти и до повишаване на корозионната устойчивост на покритията.

Сорбенти за пречистване на течности;

➤ Изследвани са възможностите за отстраняване на Cu^{2+} йони от водни разтвори с помощта на растенията *Mentha spicata L.* (MS) (джоджен) и *Ruta graveolens L.* (RG) (седефче). Резултатите показват, че изследваните биосорбенти могат да се използват успешно за отстраняване на кадмиеви и медни йони от замърсени водни разтвори и по-добра адсорбционна способност имат спрямо мед.

Адсорбенти за CO_2 и за съхранение и пречистване на съвременни горива;

➤ Чрез обработка с тетраетиленпентамин (TEPA) са получени аминоксидирани силикатно-въглеродни композити с подредена мезопореста структура. Модифицираните силикатно-въглеродни композити в сравнение с немодифицирани показват по-високи адсорбционен капацитет и количества задържан CO_2 от газов поток, поради включване на хемосорбция наред с адсорбцията на CO_2 .

➤ Микропорозна металорганична структура (MOF) на базата на Al тримезат, означена като MIL-96(Al), бе използвана като порьозен хибриден пълнител за разработването на смесени матрични мембрани за след-горивно разделяне на CO_2/N_2 . Комбинацията от *in-situ* ИЧ спектроскопия и експерименти на ко-адсорбция на CO_2/N_2 показаха, че наночастиците от MIL-96(Al) имат висок афинитет към CO_2 вследствие на силното взаимодействие на молекулите на CO_2 с адсорбционни центрове като Al^{3+} киселинни центрове по Люис, координирана вода и хидроксилни групи.

➤ С ИЧ спектроскопия са изследвани адсорбционните форми на CO_2 върху MIL-53(Al) и MIL-53(Al)-OH_x и е изяснен наблюдавания висок адсорбционен капацитет на металоорганична структура функционализирана с хидроксилни групи MIL-53(Al)-OH₂₅. Установено е, че структурните $\mu_2\text{-OH}$ групи са основните адсорбционни центрове, формиращи $\text{OH}\cdots\text{OCO}$ комплекси.

Инфрачервена спектроскопия на повърхностни съединения и механизми на каталитични реакции;

➤ За изясняване на реакция на епоксидиране в газова фаза при каталитичното производство на пропенксид и по конкретно първия етап на адсорбция и активиране на пропен са изследвани специфичните активни адсорбционни центрове върху наночастици от Au нанесени на титанов диоксид (Au/TiO₂) посредством ИЧ спектроскопия и термо-програмирана десорбция. Идентифицирани са два начина на свързване на пропен с повърхността - с TiO₂ чрез π-връзка и с Au-центрове чрез (πσ)-връзка, която има по-силна свързваща енергия. Предполага се, че при координацията на пропен към Au-център, той се активира и това е първа стъпка в реакцията на епоксидиране до пропенксид.

Функционални материали и наноструктури за детектиране на вредни газове емисии в околната среда.

➤ Съвместно с учени от ХТМУ-София са проведени изследвания на стронций-заместени барието-титанатни стъклокерамики за сензорни приложения. С рентгенова фотоелектронна спектроскопия са изследвани серия стъкла от типа: а) 23.1Na₂O/(23.1-x)BaO/xSrO/23TiO₂/17.4SiO₂/7.6B₂O₃/5.8Fe₂O₃, x = 3, 6, 9 мол% ;b) 20.1Na₂O/(23.1-x)BaO/xSrO/23TiO₂/17.4SiO₂/7.6B₂O₃/3Al₂O₃/5.8Fe₂O₃, x=0.5, 1, 2, 3,6 и 9 мол% и са определени химичния състав и валентното състояние на елементите.

➤ Изследвани са няколко типа модифицирани наноструктури от ZnO получени чрез импулсно лазерно отлагане с цел разработване на материали за газови сензори. Показано е, че най-подходяща за газов сензор е наноструктурата от вида ZnO/Ag/Si, която се характеризира със специфична морфология, със значително количество кислородни ваканции и наличие на метални наночастици от Ag на повърхността. Модифицирането на наноструктурата ZnO/Ag/Si с Pd наночастици води до повишаване на чувствителността ѝ спрямо CO, NH₃ и пари на ацетон, като тя е най-висока по отношение на парите на ацетона.

➤ Изучени са температурите на структурните и магнитните фазови преходи на прахообразен Ba₂Mg₂Fe₁₂O₂₂ (Y-тип хексаферит), получен по два различни начина. Структурното уточняване разкри, че при поликристалните образци Mg и Fe йони заселват едновременно всички 14 катионни позиции в структурата, докато при монокристалния образец те заемат различни места. Независимо от различното катионно разпределение феримагнитната структура се запазва.

Тема В: Оползотворяване на природни ресурси и екологичен мониторинг

Оценяване и подобряване на екологичното състояние на замърсени природни води и почви;

През годината продължи изследването по оценка на геоакумулацията и мобилността на преходни йони в почви от района на гр. Кърджали. Установено е, че:

- 1) във водните проби най-широко разпространеният замърсител е Zn, последван от Cu, Mn и Cd;
- 2) в почвите Cd е най-значим замърсител, последван от Pb и Zn. Концентрацията на Co, Mn, Al Fe, Ni и Cu е под максимално позволената. Замърсяването на почвите в природните зони е около 2 пъти по-ниско отколкото в замърсените зони, където всички определени преходни метали надвишават няколко пъти максимално позволената концентрация;

3) най-опасни за екосистемата са Mn, Co, Ni, Cd във водите и водните почвени екстракти и Zn във водните почвени екстракти, тъй като те съществуват главно като свободни Me^{2+} йони.

➤ Изследвана е адсорбцията на сребърни йони върху биосорбенти, а именно хидролизирани лигно-целулозни материали на основата на тополя и акация получени от колеги от ХТМУ-София. Показано е, че биосорбентите са перспективни като адсорбенти за сребърни йони и катализатори с нанесени сребърни йони върху повърхността им.

➤ Продължиха изследванията върху пречистване на замърсени водни разтвори от органични багрила с използването на нови хибридни силикатни материали, предоставени от ХТМУ – София. Разработен е спектрофотометричен UV-VIS метод за определяне концентрацията на Ериохром черно Т в изходните разтвори и във филтратите. Резултатите показват, че изследваните адсорбенти могат да се използват успешно за пречистване на замърсени води от багрилото Ериохром черно Т.

➤ Изследван е процесът на образуване на силикагел от натриев силикат след алкално автоклавно третиране на медна шлака с цел оползотворяване на промишлен отпадък и получаване на адсорбент. Оценен е ефектът на разреждането на изходния разтвор, типа на минералната киселина при неутрализацията, крайното рН при получаване на гела и начина му на сушене върху размера и хабитуса на частиците, специфичната повърхност и порьозността на силикагела по отношение на възможни приложения на получените материали. С използваната методика се получават силикагелове със специфична повърхност от порядъка ($600-700 \text{ m}^2/\text{g}$).

Получаване, съхранение и оползотворяване на български природни ресурси (по-специално минералните ресурси на Черно море) за нуждите на козметиката и фармацията;

➤ Изследвана е черноморска лиманна кал от региона на Бургаския залив и е установено, че тя има собствена микрофлора, не съдържа нормираните за козметични продукти специфични микроорганизми и е безопасна за организма.

➤ Изследвана е приложимостта на адсорбент, получен от възобновяем селскостопански отпадък, оризови люспи за дълбоко адсорбционно десулфуриране на течни горива. Определени са адсорбционният афинитет, равновесният адсорбционен капацитет и термодинамиката на адсорбция на тиофен (Т), бензотиофен (BT) и дибензотиофен (DBT) с пиролизирани оризови люспи (PRH) от моделно и търговско дизелово гориво. Висока адсорбционна способност (над 40 т. %) на пиролизираните оризови люспи се наблюдава при ниски начални концентрации на обща сяра в горивото (до 1000 ppm). Адсорбентът успешно може да се използва за дълбоко доочистване на въгледородните нефтени фракции, съдържащи слабореактивните тиофенови съединения.

➤ Изследвана е възможността пепелта от оризови люспи да се използва като пълнител за еластомерни композити на база естествен каучук. Изследването включва определяне на вулканизационните характеристики на смеси и техните физикомеханични показатели; устойчивост на топлинно стареене, както и на динамичните свойства на вулканизатите, съдържащи RHA.

Тема Г: Нови подходи за инструментален и теоретичен анализ на материали

Спектроскопски методи за анализ на локалната структура на твърдотелни материали: електронен парамагнитен резонанс, ядрено-магнитен резонанс, вибрационна спектроскопия, електронна спектроскопия във видимата област; електронна спектроскопия на твърди повърхности;

➤ В рамките на съвместен българо-френски проект са извършени експериментални изследвания на мезопорести материали на основата на алуминиев оксид. С метода рентгенова фотоелектронна спектроскопия е определено валентното състояние на сребърните йони, внедрени в порите на високопорест γ - Al_2O_3 оксид

➤ В рамките на сътрудничество с института по физика в Университет „Мартин Лютер“, Хале, Германия са проведени първоначални експерименти по отлагането на тънки слоеве EuO върху повърхността на $\text{Pd}(100)$. Дебелината, стехиометрията и структурата на израствания оксиден филм се контролира чрез Оже-електронна спектроскопия (AES), спектроскопия на енергетичните загуби на разсейващи се електрони (HREELS) и дифракция на ниско-енергетични електрони (LEED).

➤ Чрез ИЧ и Раман спектроскопия при стайна и ниска температури посредством техниката на изотопния обмен съвместно с македонски учени са изучени детайлно вибрационните характеристики на кристалохидратните соли калиев димагнезиев хидрогендифосфат 15-хидрат и калиев димагнезиев хидрогендиарсенат 15-хидрат, $\text{KMg}_2\text{H}(\text{XO}_4)_2 \cdot 15\text{H}_2\text{O}$ ($\text{X} = \text{P}, \text{As}$), които са интересни от гледна точка на протонна проводимост при температури до 70°C .

➤ Съвместно с учени от Македония са получени нови данни за термичните свойства и за корелации от типа ИЧ спектри-структура на слабо изучения магнезиев йодид октахидрат, $\text{MgI}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. Установено, е че термичното разлагане на кристалохидрата е сложен процес, включващ двустепенна дехидратация и хидролитично разпадане с образуване на междинен магнезиев хидроксийодид със състав $\text{Mg}(\text{OH})_{1.44}\text{I}_{0.56}$.

➤ Разтворимостта на медни йони в натриево никелово сулфатни кристалохидратни соли с бьодитен тип структура е проследена чрез използване на комбинация от дифракционни, вибрационни и магнитно резонансни методи. Чрез *in-situ* прахова рентгенова дифракция е изучен процеса на структурно преобразуване на бьодитните фази в хода на частичното и пълно отделяне на кристалната вода.

➤ Структурата на комплекси на медни йони с денримери е определена чрез ЕПР спектроскопия. Показано е, че 17 медни йона са включени в денримерния комплекс. Информацията от тези изследвания може да послужи за обясняване на микробиологичната активност на комплексите. Изследванията се провеждат съвместно с колеги от ФХФ-СУ.

Квантовохимично моделиране и симулации на структура и спектроскопски свойства на метал-съдържащи материали;

➤ Теоретично са изследвани абсорбционните свойства на хромофора на зеления флуоресциращ протеин (ГФП) в зависимост от протонираната форма и обкръжаващата среда с цел контрол на оптичните свойства за биосензорна приложимост. Абсорбционните спектри са изчислени с отчитане на вибро-електронното взаимодействие и симулиране на ширината на абсорбционната ивица. Предсказано е съществуването на анионната и неутрална форма на хромофора в ГФП, които са отговорни за флуоресценцията.

- С квантово-химични периодични изчисления е изучена структурата и спектроскопските свойства на нов полимерен Zn-цистаминов комплекс и негов аналог с потенциални биологични свойства. Интерпретирани са ИЧ спектри на полимерните комплекси в твърдо състояние и са определени характеристичните вибрационни моди на лигандите, по които може да се съди за начина им на координиране към металния йон.
- Чрез теоретични (DFT и периодични-DFT) и експериментални изследвания са изучени структурните и вибрационни характеристики на цис-диаминдихлороплатинат (цисплатина) на молекулно и надмолекулно ниво (в обем). Показано е водещото значение на три-дименсионалната мрежа от водородни връзки в кристала за наблюдаваната структура, както и за вибрационните (Раман) характеристики.
- Чрез периодични DFT изчисления са изучени структурата и вибрационните (ИЧ и Раман) свойства на два алкилендиамониум хексафлуоросиликата, $\text{NH}_3(\text{CH}_2)_n\text{NH}_3\text{SiF}_6$ ($n = 4$ и 6). Оценена е силата на N-H...F водородното свързване в двете съединения и ролята на три-дименсионалната мрежа от водородни връзки при формиране на намерените структури. Намерено е, че Si-F вибрациите могат да се използват за оценка на относителната сила на водородните връзки в серията хексафлуоросиликати.
- Изследвана е коадсорбцията на азотен оксид и азотен диоксид върху зеолити със шабазитна структура при различни катионни разпределения с метода на молекулна динамика. Получени са резултати за активиращите енергии на реакцията на дисоциация до азот и кислород, като са изследвани подробно елементарните стъпки на реакционния механизъм. На основата на тези резултати могат да бъдат подбрани оптимални структури за едновременното разграждане на азотен оксид и азотен диоксид, при благоприятни условия в сравнение с разлагането на чист азотен оксид.
- Изследвани са катионни двойки в зеолит клиноптилолит с методите на молекулна динамика с цел оптимизиране на адсорбционните свойства по отношение на фосфати. С най-висок адсорбционен капацитет се отличават двойките катиони натрий-калций следвани от натрий-натрий в присъствие на киселинни центрове.
- Изследвани са мостово-свързани катиони в зеолити ZSM-5 с метода на функционала на електронната плътност. Катионите на желязо и кобалт формират стабилни и едновременно с това реактивоспособни мостови комплекси със съра-сдържащи лиганди. Преносът на заряд от зеолита към металните катиони е определящ в реакциите на редукция и за разлагане на вода.

Инструментални изследвания на неорганични и органични археологически артефакти с оглед проучване на технологичното развитие в българските земи.

- В рамките на общоакадемичния проект „ТРАКИ” бе изследвана древната технология за създаване на метални и бронзови предмети и на стенна хоросанова мазилка и пигментирана щукатура чрез използване на комплекс от неструктивни физични, химични, спектрални, минераложки методи и тяхното комбиниране с археологичен формално-типологичен и стилистичен анализ. Ролята на института бе в прилагане на неструктивни методи за анализ на повърхността на метални артефакти (като РФС), както и на локалната структура на пигментирани мазилки чрез ТЕМ и ЕПР. Показано е, че траките са били отлични строители и са имали завидни умения при работа с минералите и комбинирането на техните цветови характеристики при изработване на пигменти с желани нюанси. Също така те са владеели добре

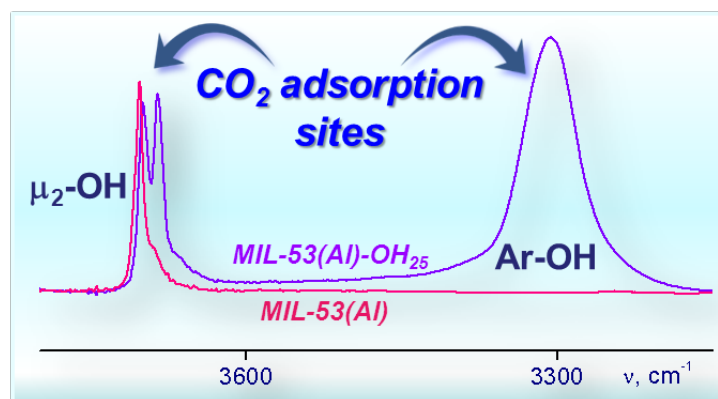
технологията на обработка на бронза, като съставът на сплавите при предметите е различен в зависимост от тяхното предназначение.

➤ Валидиран е ICP-OES метода, разработен за анализ на макро- и микрокомпоненти в археологични стъкла. За целта е използван сертифициран сравнителен материал CRM BAM-S005 (Soda-Lime-Glass Type A), както и вътрешнолабораторен стандарт, представляващ проба-прозоречно стъкло от VI-ти век, предварително анализирана с метода за директен анализ на твърди проби ETV-ICP-OES. Налице е отлично съвпадение на експерименталните резултати със стойностите от сертификата.

2.1. Най-значимо научно постижение в ИОНХ

Ефективно улавяне на CO₂ от функционализирани металорганични структури

Металорганичните структури са обещаващи материали за улавяне на CO₂. С помощта на ИЧ спектроскопия бе изяснено как функционализирането на органичните лиганди на металорганична структура на базата на Al хидрокситерафталат води до получаването на нов материал с подобрени свойства за улавяне на CO₂.



Сравнителни CO₂ адсорбционни измервания на два металорганични образца (MIL-53(A1)-OH_x и MIL-53(A1)).

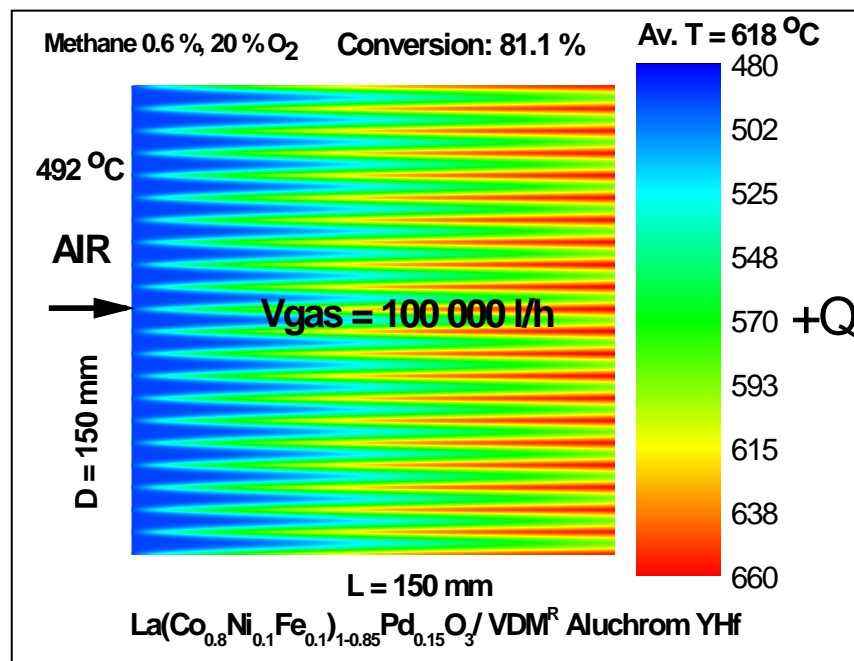
Ръководител: Константин Хаджииванов

Публикация: S. Andonova, E. Ivanova, J. Yang, K. Hadjiivanov, *J. Phys. Chem. C* 121 (2017) 18665.

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение в ИОНХ

Монолитни катализатори за почистване на димни газове от битови отоплителни инсталации

В ИОНХ се работи върху създаване на каталитични монолитни елементи за почистване на димни газове от битови отоплителни инсталации, като се цели и повишаване на тяхната енергийна ефективност чрез доизгаряне на въглеродния оксид и въглеводородите в отпадните газове. Селектирани са активни фази, характеризиращи се с повишена устойчивост в присъствие на водни пари и серен диоксид, т.е при условия близки до тези в практиката. Разработват се методи за устойчиво нанасяне на каталитично активна фаза чрез формиране на многослойни системи, съдържащи оксиди на Al, La, Ce, Ti, Zr и Si и паладий съдържащи перовскити. За носител се използва утвърден в практиката промишлен материал (VDM® Aluchrom Yhf, VDM Metals GmbH, фирма към Krupp Thyssen, Германия), представляващ сплав Fe-Cr-Al.



Генериране на топлина чрез каталитично изгаряне на метан върху каталитичен елемент на базата на неръждаема стомана VDM® Aluchrom YHf с цел повишаване на енергийната ефективност при почистване на парникови газове.

Ръководител на разработката: Антон Найденов.

3. Международно научно сътрудничество на ИОНХ

През 2017 година ИОНХ продължи участието си в международен проект по 7 РП на ЕС в областта на научноизследователската и развойна дейност на тема Енерго-ефективни смесени матрични мембрани, базирани на MOF, за улавяне на CO₂ – M⁴CO₂".

Учен от ИОНХ участва в нов проект към ФНИ (спечелен през 2017 г), на тема „Електронни и оптични свойства на екстремни нанонишки” по програма за двустранно сътрудничество България-Франция, с базова организация СУ.

През 2017 г. бяха одобрени два проекта за достъп до изследователска инфраструктура – „Неутронна дифракция” в рамките на европейски програми и фондове. „Application for beam time "Crystal structure of mixed sodium cobalt-manganese sulfates" – Будапеща, Унгария и "Beam time request "Long range atomic and magnetic order in mixed sodium cobalt-manganese sulphates" – Сакле, Франция.

През 2017 г. учени от ИОНХ са били ръководители на 5 теми по междуакадемични договори и споразумения: 2 - с Израел, 1 – с Македония, 1 с Турция, 1 със Сърбия. Един проект с Израел е приключил през 2017 г. и друг е стартирал през същата година. Съвместните изследвания с учени от Израел продължават и са върху материали за катодни в литиево-йонни батерии. Съвместни проекти с учени от Университет „Св.св. Кирил и Методи” в Скопие и от Сръбската академия на науките и изкуствата (Институт по химия, технология и металургия, Център по катализ и химично инженерство) стартират през 2017 г., като продължение на дългогодишни научни контакти и са на тема съответно „Структурно характеризирание и изследване на електричните и каталитични свойства на новосинтезирани неорганични орханично-неорганични комплексни перовскити” и „Хетерогенно каталитична и фотокаталитична деструкция на органични и фармацевтични замърсители в природата посредством многокомпонентни системи”. През 2017 г. продължава проекта на ИОНХ с ТЮБИТАК (Турция) на тема „Церий-съдържащи акумулиращо-редукционни катализатори за контрол на емисии от NO_x: Влияние на CeO₂ върху каталитичните свойства и природата на адсорбираните съединения”. Изпълнението на два двустранни проекта с Македония и Индия от 2010 и 2011 година е замразено поради липса на финансиране от ФНИ.

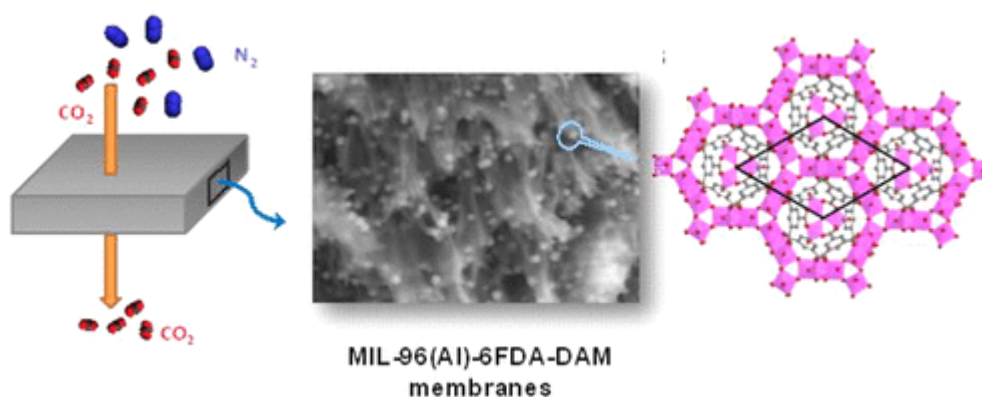
Международното сътрудничество на учените от ИОНХ на институтско ниво е и под формата на неформални контакти за съвместни изследвания с колеги от чуждестранни научни институции. Свидетелство за активното международно сътрудничество на учените от ИОНХ е факта, че от общо 105 публикации през 2017 г., 42 са със съавтори от чужбина. Двама учени от ИОНХ имат лично участие в европейски проекти и програми - Deutsche Forschungsgemeinschaft и COST Action TD1305 iPROMEDAI, Improved Protection of Medical Devices Against Infection.

Най-значим проект за ИОНХ.

Проект No 608490 по 7РП на ЕС „Енерго-ефективни смесени матрични мембрани, базирани на MOF, за улавяне на CO₂ – M4CO2”

M4CO2 е мащабен съвместен изследователски проект, финансиран от ЕК с общ бюджет над 10 милиона евро. Целта на проекта е да се разработят енергийно ефективни смесени матрични мембрани за пред- и следгоривно улавяне на CO₂ (съответно CO₂/H₂ и CO₂/N₂ разделяне) от топлоелектрически централи и енергоемки производства на базата на нова генерация порести металорганични структури и полимери.

В ИОНХ бяха изследвани редица нови металорганични структури посредством *in situ* ИЧ спектроскопия. По този начин бе получена важна информация за тяхната чистота, хидротермална стабилност, свойства на повърхността и достъпност на порите, както и за механизма на адсорбция на CO₂. Така например бе установено, че наночастици от микропорест Al тримезат (MIL-96) показват висок афинитет към CO₂ поради наличието на Al³⁺ киселинни центрове по Люис и структурни хидроксилни групи. CO₂ дори измества водните лиганди на Al³⁺ центрове, което обяснява високия адсорбционен капацитет на този материал в присъствие на водни пари. Тези свойства, както и добрата съвместимост между MIL-96 и полимера 6FDA-DAM позволиха разработването на хомогенни композитни мембрани, които превъзхождат чистите полимерни мембрани за CO₂/N₂ разделяне.



Ръководител: Константин Хаджииванов

4. Участие на ИОНХ в подготовката на специалисти

Основната дейност на ИОНХ в областта на подготовката на специалисти е свързана с докторантите. Качеството на обучението на докторанти е много добро, тъй като Институтът разполага с квалифицирани учени, необходимата апаратура (максимално добра за условията в България) и има опит и традиции. През 2017 г. в ИОНХ са зачислени 2-ма докторанти (редовна форма на обучение и самостоятелна форма на обучение) и са обучавани общо осем докторанти по следните специалности от *научно направление „Химически науки“*: неорганична химия, химия на твърдото тяло, химична кинетика и катализ, аналитична химия. Трима учени от Института са съръководители на докторанти в други научни организации. През 2017 г. успешно са защитили дисертационните си трудове четирима докторанти по специалности химия на твърдото тяло и неорганична химия. ИОНХ продължи през 2017 г. да осигурява особено добри условия за развитие на научния потенциал на младите учени. Девет докторанти,

защитили дисертации в периода 2012-2017 г., продължават научната си кариера в ИОНХ, усъвършенстват работа си със специализирана апаратура, участват активно в научни проекти на Института. Шест проекта по "Програма за подпомагане на младите учени в БАН", финансирана от Министерство на образованието и науката са приключили успешно през 2017 г, и нови два проекта са спечелени в ИОНХ през същата година. За изпълнението си на проект на тема: "Обратима интеркалация на литий и натрий в слоестия оксид $\text{Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/2}\text{Mn}_{1/2}\text{O}_2$ като катод в нови литиеви и натриеви клетки с $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ и $\text{Na}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$ като аноди" млад учен от ИОНХ е получил награда Диплома Отличен проект в направление „Нанонауки, нови материали и технологии“. Действащите проекти и активното участие на млади учени в научни форуми, допринася за развитие на тяхната активна и самостоятелна научно-изследователска дейност и успешно интегриране в европейското изследователско пространство.

През 2017 година в ИОНХ са обучавани 6-ма студенти от ХТМУ и ФХФ-СУ чрез студентски практики. Учени от ИОНХ са включени в преподавателска дейност към Медицински университет –Плевен, курс по аналитична химия (30 ч). Учен от ИОНХ е изнесъл лекции на тема „Нанотехнологиите в медицината“ (4ч.) към Института по експериментална морфология и патология и антропология с музей, БАН. Шестима учени от ИОНХ са участвали в изпитни комисии по конкурс за академична длъжност „главен асистент“ и за докторантура

През годината в ИОНХ не е имало избор на нова длъжност.

5. Иновационна дейност на ИОНХ е свързана с разработване на иновативни продукти и технологии на основата на морски води и луги, и възобновяеми селскостопански отпадъци, организиране на малки производства на медицинска натурална козметика за бизнеса.

През 2017 г. са разработени технологиите, регистрирани са и е организирано производството на 9 нови продукта с марката Black Sea Stars. Сключени са 5 нови договора с фирми. 168 продукта с марките Solilug, Sea Stars и Black Sea Stars и Argamin са нотифицирани в CPNP козметичната база данни в Брюксел.

През 2017 г. ИОНХ има 6 действащи-стари патента и три патента са в експертиза-стари.

ИОНХ има споразумение за проучване с фирмата Haldor Topsoe, Дания, в рамките на което са разработени специфични експериментални подходи за изследване на нови и доказани в практиката индустриални катализатори, производство на фирмата.

6. Стопанска дейност на ИОНХ

Стопанската дейност на ИОНХ през 2017 г. се осъществява под формата на вътрешен договор с Института „Химия на водно-солеви системи за оползотворяване на природни минерални ресурси и отпадни продукти, в частност морски химически ресурси и включва производство“ и продажба по поръчки от фирми дистрибутори и индустриални фирми на разработените продукти от сериите *Sea Stars*, *Black Sea Stars*, *Solilug* и *Argamin*. Сключени са 5 нови договора с фирми. Регистрирани са 9 нови продукта за медицинската козметика под марката Black Sea Stars и е организирано тяхното производство. Производството в пилотната ни база в Бургас на продукти по технологии и с наши марки през годината е на обща стойност 422 678 лева лв. (с ДДС), от продажба на козметична серия продукти, поръчани от фирми от страната и от чужбина. Основни клиенти са: Оптимални системи ООД, Белан ЕООД, Антоа трейд ЕООД, Контеса БГ ЕООД, ЕТ ДВТ Таля Христова, Релакс би ЕООД, Глобикс ЕООД, както и фирми от Украйна, Латвия, Чехия, Хърватска. Част от средства (около 25 000

лв) са инвестирани в сградния фонд на базата в Бургас, като продължава поэтапната подмяна на стените на халето с термоизолационни панели и дограма. Поддържа се web страница <http://www.seastars-solilug.com> за реклама на дейността по разработените морски води и луги. Финансирането на разработките е от средствата от продажбата на готови продукти.

От извършени анализи - основни клиенти са институти на БАН, СУ, НИС към ХТМУ, а от индустриалния сектор - Сенсата технолоджи ООД, Агрополихим ЕООД, Барит Майнинг ЕООД, 365 БГ ЕООД, Карбофит ООД, Вал Технолоджи ЕООД и др. са получени общо 78 199 лв.

От сключен договор с международна фирма - Халдор Топсо-Дания са получени са 76 043 лв;

ИОНХ има сключен договор с фирма „Авенд” ООД за отдаване място във фойето на третия етаж на бл 11 на БАН за кафе-автомат за сумата 60 лв. на месец, или 720 лв годишно.

7. Кратък анализ на финансовото състояние на ИОНХ

През 2017 г. приходите на ИОНХ се формират от:

- бюджетна субсидия –	1 385 472 лв.;
- приходи от наеми –	720 лв.;
- приходи от продажба на продукцията (вкл.ДДС)–	422 678 лв.;
- приходи от такси обучение докторанти –	510 лв.;
- приходи от извършени анализи –	78 199 лв.;
- договори с чуждестранни фирми (Халдор Топсо-Дания) –	76 043 лв.;
- договори с българска фирма (ГАРБ Оудиънс межърмънт България)	4 000 лв.;
- трансфери от Фонд „Научни изследвания” –	225 247 лв.;
- трансфер от ФХФ –СУ –дарение за изплащане на таксата за IURAC	350 лв.;
- трансфер от М-во на земеделието и горите (по договор ДН 07-28)	8 742 лв.;
Трансфер от БАН Администрация средства за финансиране на	
- 6 проекта за Млади учени -	21 579 лв.;
- по договор „Траки ...”	10 575 лв.;
- трансфер от И-т по металознание-БАН (по ДФНИ 07 2)	23 600 лв.;
Трансфер от И-т по електроника-БАН като патнърор	
по проект ДФНИ 08-4	17 000 лв.;
по проект ДФНИ 08 16	6 125 лв.;
по проект ДН 09-13	6 250 лв.;
- приходи от продажба на бракувани активи и др. –	4 267 лв..

Това означава, че Институтът е получил средства извън бюджетната субсидия в размер на 905 885 лева или съотношението на собствените средства към тези от бюджетната субсидия за 2017 г. е 39.53 % към 60.47 %.

С бюджетната субсидия са покрити изцяло разходите за заплати (1 160 109 лева), осигуровки (217 643 лева), обезщетения при пенсиониране – 15 885 лева и за стипендии за 1 редовен докторант – общо 5 400 лева и издръжка за докторанта – 3 148 лв. Допълнително са изразходвани за придобиване на докторски степени 5 000лв, от които 3 000 лв. предстои да бъдат възстановени през 2018 г. За режийни разходи – ток, вода и парно, са изразходвани също собствени средства в размер на 57 204 лева. Разходите по научно-изследователската дейност на ИОНХ бяха изцяло със собствени средства.

Плановата численост на ИОНХ-БАН към 31.12.2017 е 125 бр., като реално заети са 113 бр.

Средната годишна брутна работна заплата по план е 9 281 лв. (средна месечна 773 лв.); а по отчет съответно 9 915 лв. (средна месечна 826 лв.). За сравнение, тя е 59 % от средната работна заплата за София-столица. Размерът на допълнителните възнаграждения, изплатени по проекти възлиза на 262 313 лв., от които 93 218 лв. по 7РП-ДЕС и 169 095 лв в Бюджета по проекти, финансирани от ФНИ и други източници (стопанска дейност и фирми-чуждестранни партньори).

8. Издателска и информационна дейност на ИОНХ

ИОНХ няма собствена издателска дейност. Учените от ИОНХ нямат достъп до специализирана литература и до базите данни на Scopus, налична е само тази на ISI Web of Knowledge, което затруднява литературната справка и научната дейност.

9. Информация за научния съвет на звеното

Научният съвет на Института по обща и неорганична химия – БАН е избран на 14.12.2015 г. (протокол N 35 от Общото събрание на учените в ИОНХ).

НАУЧЕН СЪВЕТ
НА ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ
НА БЪЛГАРСКАТА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ

№	Име, презиме, фамилия	Научна степен и научна специалност, по която е получена	Научно звание и научна специалност по която е получено	Област на компетентност	
1	Пламен Кирилов Стефанов	Д-р Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН
2	Радостина Константинова Стоянова	Д-р Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Неорганична химия	ИОНХ-БАН
3	Даниела Георгиева Ковачева	Д-р Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Структура, механични и термични свойства на кондензираната материя	ИОНХ-БАН
4	Антон Илиев Найденов	Д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
5	Константин Иванов Хаджииванов	дхн Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ Неорганична химия Аналитична химия	ИОНХ-БАН
6	Рени Стоилова Йорданова	Д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН
7	Ивелина Мирчева Георгиева	Д-р Неорганична химия	доцент Теоретична химия	Теоретична химия Неорганична химия	ИОНХ-БАН
8	Екатерина Николаева Жечева	Д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН

				Химична кинетика и катализ	
9	Диана Тодорова Рабаджиева	Д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
10	Наташа Средкова Трендафилова	Д-р Теоретична химия	професор Теоретична химия	Теоретична химия Неорганична химия	ИОНХ-БАН
11	Кристина Костова Чакърва	Д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
12	Красимир Любенов Костов	Д-р Химия на твърдото тяло	доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Физикохимия Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
13	Михаил Йорданов Михайлов	Д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
14	Иванка Петрова Спасова	Д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
15	Елена Здравкова Иванова	Д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
16	Стефка Стоянова Тепавичарова	Д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
17	Виолета Георгиева Колева	Д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН

18	Ели Георгиева Григорова	Д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
19	Тони Георгиев Спасов	дхн Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Химична кинетика и катализ Физикихимия Неорганична химия	ХФ-СУ
20	Весела Цакова-Станчева	дхн електрохимия	професор физикохимия	Електрохимия Физикохимия	ИФ-БАН
21	Никола Георгиев Малиновски	дхн Физикохимия	професор Физикохимия	Физикохимия	ИОМТ-БАН
22	Митко Петров Георгиев	Д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия	ХТМУ
23	Елисавета Христова Иванова	дхн Аналитична химия	професор Аналитична химия	Аналитична химия	ИОНХ-БАН
24	Анелия Станчева Йорданова-млад учен с право на съвещателен глас	Д-р	Гл.ас.		ИОНХ-БАН

10. Копие от правилника за работа в ИОНХ.

Линк <http://www.igic.bas.bg/bulletin/bul75.pdf> (Брой 75 (21.02.2014 г.) Правилник за устройството, дейността и управлението на Института по обща и неорганична химия при Българската академия на науките.

11. Съкращения използвани в отчета на Институт по обща и неорганична химия за 2017 г.

ИОНХ	Институт по обща и неорганична химия
МОН	Министерство на образованието и науката
НСНРИ	Националната стратегията за развитие на научните изследвания
ЗНИИ	Закон за насърчаване на научните изследвания
РП	Рамкова програма
ИФХ	Институт по Физикохимия
НАОА	Национална агенция за оценяване и акредитация
ИСИС	Иновационна стратегия за интелигентна специализация
ИЕЕС	Институт по електрохимия и енергийни системи
ИМК	Институт по минерология и кристалография
УХТ	Университет по хранителни технологии
ИИХ	Институт по Инженерна химия
ФХФ	Факултет по химия и фармация
ФзФ	Физически факултет
ХТМУ	Химикотехнологичен и металургичен Университет
РФС	рентгенова фотоелектронна спектроскопия
НАИМ	Национален археологичен институт с музеи
ИЧ	Инфрачервена
ТФП	Теория на функционал на плътността
H ₂	водород
ХМДСО	хексаметилдисилоксан
МВ	метиленово синьо
IC	индиго кармин
TXRF	рентгенофлуоресцентен анализ с пълно вътрешно отражение
МВ	Метиленово синьо
IC	Индиго кармин
SEM	Scanning electron microscopy
AFM	Atomic force microscopy
МУ	Медицински университет
ТУ	Технически университет
УХТ	Университет по хранителни технологии