

ОТЧЕТЕН ДОКЛАД

на ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

за 2019 г.

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

януари 2020 г.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ИОНХ

1.1. Преглед на изпълнението на целите на ИОНХ.

Дейностите и научните изследвания в ИОНХ през 2019 г. следват разработената Стратегия за развитие на ИОНХ за периода 2018-2030 г. и са в отговор на динамично променящите се икономически и социални предизвикателства свързани с енергийната ефективност и оползотворяването на природни ресурси. С изпълнение на Стратегията ИОНХ се утвърждава като водещ национален изследователски и иновационен център по химия на материали и процеси с екологична насоченост. През 2019 г., в ролята си на **координатор**, ИОНХ продължи активната си работа по изграждането и развитието на **Националния център за върхови научни постижения „Мехатроника и чисти технологии“** - 2018, създаден в рамките на ОП НОИР. Институтът участва с най-значимите си постижения по следните теми: материали и тънки филми за опазване на околната среда; материали за съхранение на чиста енергия, керамика, биокерамика и стъкла за по-добър живот. През 2019 г. ИОНХ се включи като **партньор** в изграждане на **Национален център по компетентност „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил) (2019-2023 г)** по ОП НОИР. За постигане на стратегическата цел, провежданите научни изследвания през 2019 г. продължиха в значими тематики за обществото и в изпълнение на три национални научни програми, целево финансирани от държавата: (1) **„Нисковъглеродна енергетика за транспорта и бита“. Е+;** (2) **„Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“;** (3) **„Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“.**

Научните изследвания в ИОНХ през 2019 г. са по теми от научно-изследователския план на ИОНХ в съответствие с приоритетните направления на Стратегията за развитие на науката в България до 2030 г.: Енергия и енергийна ефективност, зелени и еко технологии, нови материали и фундаментални изследвания. Изследванията се провеждаха в рамките на **36 проекта** на Института и **8 проекта** с лично участие на учени. Проектното финансиране е от различни източници като ОП, ФНИ, МОН, инфраструктурни проекти по научна пътна карта, чуждестранна фирма и вътрешно-институционален договор. Резултатите от изследванията са отразени в общо **111 научни публикации**, от които **94 са в индексирани издания в международна база данни SCOPUS и Web of Science**. Научните изследвания са представени на **59 научни форума** у нас и в чужбина под формата на **112 доклада**. Върху научните трудове на учени от ИОНХ през 2019 г. са забелязани **2911 цитирания**. ИОНХ поддържа традиционно международно сътрудничество, в резултат на което 27% от научната продукция е с **чуждестранни учени** от водещи научни организации.

Развитието и задържането на квалифицирани учени и създаване на условия за кариерно развитие е приоритетна политика в ИОНХ. През 2019 г. успешно бяха проведени **14 конкурса** за нови академични длъжности и един докторант придобити научната и образователна степен „доктор“. Чл.-кор. проф. дхн Константин Хаджииванов получи престижна награда „Jiangnan Distinguished Professorship“ от университета Тонг Жи в Шанхай, КНР за цялостната си научноизследователска дейност. Докторант Лидия Иванова бе отличена с грамота за най-успешен проект, финансиран по "Програма за подпомагане на млади учени и докторанти в БАН -2017 г." по научно направление "Биоразнообразие, биоресурси и екология". Нарастна научният капацитет на учени за ръководство и съизпълнение на проекти и за участие в национални и международни научни прояви, което ги прави конкурентни в световната наука. Подобри се материално-техническата база на Института и съответно неговия рейтинг при кандидатстване за нови проекти. С новозакупените апаратури се разкриха възможности за извършване на уникални научни изследвания. Постигнатите резултати

през 2019 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.

В изпълнение на компонент от НСРНИ в РБ за **концентриране на научната инфраструктура и изследователския капацитет в значими за икономиката направления и синергията между тях (Стълб 3)**, ИОНХ участва:

- като **координатор** в изграждането (втора година) на „Национален център по Мехатроника и чисти технологии” - 2018 г. по ОП-НОИР.
- като **партньор** в одобрен проект през 2019 г. за изграждане на Национален Център по компетентност „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил) (2019-2023 г) по ОП-НОИР.
- в **две научни инфраструктури** по национална пътна карта: 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)” и СЕВЕ-ЕССЕЛ „Съхранение на енергия и водородна енергетика“.
- в изпълнението на **три национални научни програми към МОН: „Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта” E+**, по Компонент 1 “Съхранение и преобразуване на възобновяема енергия” и Компонент 3 “Ефективни методи за улавяне и оползотворяване на CO₂”, „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот” Компонент 2 „Растително здраве и безопасност в хранителните системи” и „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия”. РП 3.1 „Качество на националните водни ресурси (повърхностни и подземни)”.
- в изпълнение на **21 научни проекта по Фонд „Научни изследвания” – МОН**, свързани с фундаментални изследвания по приоритетни теми заложи в НСРНИ в РБ и на ИСИС. В **11** проекта, **ИОНХ е водеща организация. 5-ма** учени са включени с лично участие в проекти на ФНИ и **3-ма** учени участват в проекти с други източници на финансиране.
- в Националната научна програма „Върхови изследвания и хора за развитие на Европейската наука“ Вихрен, модул „Водещ учен“ на тема „Синергизъм между катионни и анионни редокс реакции при материали с колосален интеркалационен капацитет“ (CARiM) с ръководител проф. д-р Р. Стоянова.
- в Националната научна програма „Млади учени и пост-докторанти“ към МОН – **3 проекта.**

В рамките на **Националните разпределени програми и проекти в ИОНХ** се постигна

- ✓ поддържане на инфраструктурата на ИОНХ **ИнфраИОНХ** (<http://infraionh.igic.bas.bg/>), осигуряване на средства за функциониране на апаратури, за обучение на висококвалифицирани специалисти и финансови стимули за тяхното задържане и развитие, висока компетентност и оборудване за подпомагане на високотехнологични производства и бизнеса; В рамките на проект НИ СЕВЕ бяха модернизирани и подобрени условията на работа в три химически лаборатории.
- ✓ партньорство с други секторни политики като икономика, здраве, земеделие, и партньорство с университети, научни организации и бизнес;

✓ създаване на благоприятна научна среда и подпомагане на процеса на разпространение на научните резултати.

Развитие на научен потенциал: Привличането, развитието и задържането на висококвалифицирани и мотивирани изследователи и поддържането на високо научно ниво на изследванията са следващите цели на ИОНХ в съответствие дейност 1.3. от НСРНИ. През 2019 г. в рамките на **14 конкурса** за нови академични длъжности, учени от ИОНХ получиха кариерно развитие. Активната мобилност на учените от ИОНХ се проявява в многобройните командировки (**20 в чужбина и 61 в страната**) за участие в научни форуми и работни срещи. Реализирани са **5 стипендии за научен обмен по проекти на Европейската комисия, програма Еразъм+** (в Испания, Словения, Германия и Португалия) и **една постдокторска стипендия** по DAAD в Лабораторията на проф. Пасерини от Helmholtz Institute в Ulm (Германия). С цялостната си научноизследователска дейност ИОНХ се стреми да интегрира науката в България в Европейското изследователско пространство в изпълнение на НСРНИ 2020.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности

За втора поредна година ИОНХ участва в изпълнението на три Национални научни програми за решаване на икономически и социални предизвикателства в полза за обществото. По програма „Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта” Е+, ИОНХ работи по задачи на Компонента 1 "Съхранение и преобразуване на възобновяема енергия" и Компонент 3 "Ефективни методи за улавяне и оползотворяване на CO₂". Изпълнението на програма Е+ цели обединение на научно-изследователския потенциал, което да подпомогне прехода към нисковъглеродна икономика и бързото навлизане на технологиите за съхранение и преобразуване на възобновяема енергия, водород-базираните технологии и еко-мобилност. По програма „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“, ИОНХ изпълнява РП 3.1 „Качество на националните водни ресурси (повърхностни и подземни)“ с дейност химични анализи и оценка на моментното състояние на повърхностни води и техни седименти от различни райони в България, включващи чисти, битови и индустриално замърсени води, както и води с различна соленост. По програма „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“ учени от ИОНХ участват в РП 2.4 „Възобновяеми биологични ресурси в стопанските единици“ с научна задача „Анализ на възможностите и наличните технологии за преработка и рециклиране, както и предлагане на съвременни иновативни технологични решения за приоритетните за страната биоресурси“. Ползата за обществото от научно-приложните и иновационни дейности на ИОНХ е пряко свързана с разработване на неорганични материали за безопасно съхранение на енергия, за интелигентни оптични и биомедицински приложения и оползотворяване на природни ресурси, в частност морски луги, с цел да се постигнат нови знания и да се въведат оригинални подходи и концепции в приоритетната област „Чисти технологии с акцент върху транспорта и енергетиката” по ИСИС. По поръчка на бизнеса в ИОНХ се разработват нови продукти за козметика/медицинска козметика като през 2019 г. ССПР-Бургас разработи и внедри технологии на **7 нови** продукта и организира тяхното производство. Извършването на сервизни анализи, консултации и експертизи за нуждите на фирми подпомагат икономическото и индустриално развитие на страната.

Подготовка на висококвалифицирани специалисти. Обучението на висококвалифицирани специалисти, студенти и подготовката на докторанти е дейност, съпътстваща научната с изявен обществен ефект. ИОНХ извършва обучение на съвременен ниво на млади учени, постдокторанти, докторанти и студенти в областта на химия на материалите, което е следваща дейност в полза на обществото. 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.

Обществени изяви за популяризиране на научните постижения.

- ✓ Участие на проф. д-р Р. Стоянова в „Глобална закуска за жени в химията“ с доклад на тема "Алкални или алкалоземни йони за съхранение на енергия?" (<https://www.youtube.com/watch?v=zmMX1MZSmWo>). Мероприятието е посветено на 100-годишнината на IUPAC (Международен съюз по чиста и приложна химия) и 150-годишнината на периодичната таблица на Дмитрий Менделеев.
- ✓ Представяне на постиженията на Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“ за „Батерия на бъдещето“ пред медиите (над 10): доц. д-р Д. Манасиева, гл. ас. д-р Т. Бояджиева и проф. д-р Р. Стоянова.
- ✓ Представяне на програма Е+ по радио „Дарик“: <https://darikradio.bg/150-godini-balgarska-akademia-na-naukite.html#parent=search> и на информационен форум в БАН (ЦУ). Участници - чл. кор. проф. д-р К. Хаджииванов, проф. д-р Р. Стоянова и доц. д-р Д. Панайотов.
- ✓ Научнопопулярна лекция „Фантастична светлина (Луминесценцията) на д-р Цв. Захариев в Цикъл научнопопулярни лекции "Наука на борда",
- ✓ Интервю на Диана Дончева с д-р Цв. Захариев в предаването "Преди всички" на програма Хоризонт, тема "Тайните на светещите материали", лекция от серия за популярна наука.
- ✓ Участие на ас. Н. Бойкова в предаване „Тази сутрин“ на bTV, Експерти: Белината "чудо" може да бъде смъртоносна.
- ✓ Представяне на два проекта към ФНИ от ръководителите: чл. кор. проф. д-р К. Хаджииванов и доц. д-р Д. Рабаджиева на форум „Седмица на бенефициентите на ФНИ“ 2019 г.
- ✓ Представяне на проекта „Съвместна интеркалация на алкални алкалоземни йони в дву- и тримерни структури: експериментално и теоретично моделиране“ (AlterIons) от проф. д-р Р. Стоянова, форум „Успешни проекти към ФНИ“
- ✓ Лекция на проф. Христо Баларев по повод 150 години Периодичната таблица на химичните елементи.
- ✓ Участие на ИОНХ във Фотоизложба – 150 години БАН, посветена на постиженията на научните звена на БАН.
- ✓ Участие на Лаборатория „Солеви системи и природни ресурси“ - Бургас (доц. д-р С. Тепавичарова) в многобройни кръгли маси за представяне на козметични продукти Black Sea Stars с активни съставки луга и кал от бургаските солени езера и подбрани български билки.

1.4. Взаимоотношения с други институции

➤ Сътрудничеството между учени от ИОНХ, университетите и други институти намери конкретно измерение при проекта за създаване на „**Национален център за върхови постижения по Мехатроника и чисти технологии**“ с партньори СУ „Климент Охридски“, ТУ-София, ТУ-Варна, ТУ-Габрово и ХТМУ-София, и научни групи от 12 института на БАН, както и при научните инфраструктурни и националните научни програми. Сътрудничествата между ИОНХ и български научни организации: Висши училища (ФХФ-СУ, ХТМУ-София, ФзФ-СУ, Селскостопанска академия - Институт по почвознание, агротехнологии и защита на растенията) и Институти на БАН (ИЕЕС, ИОХЦФ, ИФХ, ИП, ИЕ, Институт по минералогия и кристалография,

Институт по оптически материали и технологии, Институт за космически изследвания и технологии, Институт по металознание, съоръжения и технологии, Институт по експериментална морфология, патология и антропология с музей (ИЕМПАМ)) се реализират в действащите съвместни проекти - 21 по ФНИ, инфраструктурни, по ОП и многобройните съвместни публикации. Изследванията са основно в направления енергийни ресурси, енергийна ефективност, нанонауки, нови материали и технологии.

➤ **Участие в експертни органи.** Учени от ИОНХ участват в **27 експертни органи и организации**, повечето в областта на науката и висшето образование. По-важните са: Постоянна комисия по природни науки, математика и информатика към Националната агенция за оценяване и акредитация (НАОА) (проф. д-р Е. Жечева), Постоянна Научно Експертна Комисия по Химически науки (ФНИ-МОН) (член, проф. д-р Н. Трендафилова), Временна Научно Експертна Комисия по Химически науки (ФНИ-МОН) (2-ма учени), European Research Council (Експерт), Национален координационен съвет по нанотехнологии, Международен съюз за чиста и приложна химия (IUPAC): Национален представител и асоцииран член на Национален комитет в IUPAC Division VI, Chemistry and the Environment; титулярен член в IUPAC Division V, Analytical Chemistry.

Участия на учени от ИОНХ в съвети и комисии: Експертен съвет за Защита на населението при бедствия и аварии към Столична община, Съвет за наука към Столична община, Европейска академия, Съвет за обществени консултации към Комисията по европейските въпроси и контрол на европейските фондове в Народното Събрание, Национална изследователска мрежа, Национален съвет за наука и иновации, Комитет за наблюдение на ОП „Наука и образование за интелигентен растеж“ (МОН), Държавна Агенция „Електронно управление“ (МСПД) и неговата Експертна работна група (ЕРГ); Участие в Обществения съвет на гр. Бургас за опазване на Атанасовско езеро.

Четири участия в Експертни групи към НАОА и доклади за програмна акредитация на докторска програма „органична химия“ от професионално направление 4.2. ХИМИЧЕСКИ НАУКИ към ЮЗУ, за програмна акредитация на докторска програма „Неорганична химия“ от професионално направление 4.2. ХИМИЧЕСКИ НАУКИ, „Природни науки, математика и информатика“ на Бургаския университет, за програмна акредитация на професионално направление 4.2 „Химически науки“, от област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика към ЮЗУ, по процедура за програмна акредитация на ОКС магистър и бакалавър от професионално направление 4.2. ХИМИЧЕСКИ НАУКИ в Софийски университет-ФХФ.

➤ **Рецензии и становища по процедури.** Интензивната експертна дейност на учени от ИОНХ се изразява в изготвяне на **33** рецензии и становища от 17 учени по процедури за научни степени и академични длъжности към ИОНХ, ИОХЦФ, Института по механика, ФХФ-СУ, ХТМУ-София и ЮЗУ. Изготвена е една рецензия на дипломна работа за магистърска степен за ФХФ-СУ. Учен от ИОНХ е участвал в жури на конкурс за докторска стипендия 2019 на Фондация Карол Знание. Изготвени са **16** анонимни рецензии по проекти на ФНИ и други научни организации и **133** анонимни рецензии на статии за специализирани списания (от 17 експерти на ИОНХ).

➤ **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 на:

- 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, Съюз на химиците в България, Съюз на учените в България, Сдружение на олимпийските отбори по природни науки;
- редакционни колегии на: Current Physical Chemistry, Open Engineering, Recent Patents on Materials Science, Current Smart Materials, Asian Journal of Nanosciences and Materials; International Journal of Advances in Chemistry;
- програмни и организационни комитети на научен форум „Tenth Jubilee National Conference on Chemistry“, „International Conference on Smart Technologies IEEE 2019“, „6th World Congress on Natural Product & Synthetic Chemistry“.

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, ФХФ-СУ) и за външни заявители. За нуждите на бизнеса са извършвани анализи за сертифициране на продукцията, контрол на суровини и технологични процеси, за фирмите Сенсата технолоджи ООД, Агрополихим ЕООД, Технойон ЕАД, Карбо Енерджи ЕООД, Вал Технолоджи ЕООД, Ловенщайн България Трейд ООД, Мейк България ЕООД и др.

Във връзка с изследванията върху устойчиво използване на морските ресурси 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. През 2019 г. „Лаборатория по солеви системи и природни ресурси“ - Бургас разработи и внедри технологии на 7 нови продукта и организира тяхното производство. Разработените нови продукти за козметиката/медицинската козметика са по поръчка на бизнеса. Основни клиенти са: "РЕЛАКС БИ" ЕООД; "БИОСПЕР" ЕООД; "БЛЯК СИЙ СТАРС" ЕООД; "БЕЛАНН" ЕООД; "БЛЯК СИИ ИНВЕСТМЪНТ" ЕООД; "КОНТЕСА" ЕООД; "БИК - БЪЛГАРСКА ИЗДАТЕЛСКА КОМПАНИЯ" АД; "ДВТ-ТАЛЯ ХРИСТОВА" ЕТ; "НЮ ГРИЙНЪРИ" ЕООД; "БИОНТРА" ЕООД; "КОЗМЕТИКС БЪЛГАРИЯ ПРОФЕШЪНЪЛ" ЕООД; "ВИДЕНОВИ КО" ООД; "МЕТКОР" ООД; "ЗЕОЛИН" ЕООД. 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 и кръгли маси.

Практически дейности, свързани с индустрията, енергетиката и околната среда:

Създаден е катализатор на базата на системата $Pd/La_2O_3-Al_2O_3$, нанесен върху съвременен монолитен носител на базата на кордиеритовата керамика, който показва висока активност и стабилност на работа при продължителни изпитания в реакции на окисление на метан и пропан в присъствие на високи концентрации на водни пари.

Изгражда се експериментална система за изследвания върху реални монолитни каталитични елементи за почистване на газове, съдържащи метан, пропан и бутан.

1.5.2. Проектите, свързани с общонационални и оперативни дейности, в които ИОНХ участва са финансирани от МОН и са както следва:

ИОНХ участва в три Национални научни програми на МОН като дейностите и резултатите от първата година (2019 г.) са представени в цялостния отчет на програмите към МОН.

Проекти по Национални научни програми	Водеща организация	Координатор от страна на ИОНХ
„Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта” Е+	БАН	проф. д-р Радостина Стоянова
„Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“,	БАН и СУ	доц. д-р Диана Рабаджиева
„Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“	Аграрен университет, Пловдив	доц. д-р Паунка Новачка

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2019

2. Резултати от научноизследователската дейност през 2019 г.

Основните резултати от научно-изследователската дейност на Института следват 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;

Лаборатории:

„Интерметалиди и интеркалационни материали”

„Кристалохимия на композитни материали“

➤ Показано е, че амониево-желязо-манганови фосфати монохидрати ($\text{NH}_4\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{PO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$) образуват твърди разтвори в целия концентрационен интервал и играят роля на структурно- и морфологично насочващи прекурсори за нискотемпературен синтез на литиеви и натриеви желязо-манганови фосфати с оливинова структура като електродни материали за хибридни йонни батерии. Демонстрирана е способността на прекурсорите да осигуряват точен предварително зададен химичен състав на смесените фосфо-оливини, както и бездефектна оливинова структура с хомогенно разпределение на мангановите и железни йони. За първи път е синтезиран натриево-желязо-манганов фосфо-оливин с електрохимична активност.

➤ В сътрудничество с учени от ФХФ на СУ „Кл. Охридски” е предложен нов подход за приготвяне на електроди за литиево-йонни батерии без добавяне на електрохимично неактивни свързващи и проводящи вещества. Подходът се състои в използването на микро- и нанопорьозни метални филми като механично стабилни и проводящи матрици, в порите на които се отлага активният материал. Ефективността на подхода е демонстрирана при нанасяне по химичен път на литиево манганов фосфат (LiMnPO_4) с оливинов тип структура, характеризиращ се с по-висока плътност на енергията спрямо сега използвания литиево железен фосфат (LiFePO_4): 701 Wh/kg

спрямо 586 Wh/kg, съответно. Отложената по този начин оливинова фаза показва по-добра циклична стабилност в сравнение с конвенционален електрод от LiMnPO_4 приготвен с добавки.

➤ Разработени са оригинални методи за целенасочено получаване на натриево-железни фосфати със структура тип алуаудит, насикон, марицит и оливин. Сравняването на различните методи на синтез показва, че най-подходящ за образуването на натриево-железни фосфати със структура тип марицит, алуаудит и насикон е методът на лиофилизация, последван от термично нагряване при температури по ниски от 600 °C.

➤ Съвместно с учени от Университета в Кордоба (Испания) е показано за първи път, че смесеният сулфат на натрия, кобалта и мангана $\text{Na}_2\text{Co}_{0.63}\text{Mn}_{0.37}(\text{SO}_4)_3$ със структура тип алуаудит интеркалира обратимо Na^+ в големи количества. На тази база са разработени натриеви електрохимични клетки със сулфата като катоден материал.

➤ Предложен е бърз и лесен метод от арсенала на „меката“ химия за синтез на манганов оксид със слоеста структура Mn_5O_8 . Той се състои в разлагане при меки условия на гама-формата на мангановия оксихидроксид. Слоестият манганов оксид проявява изключителна способност да интеркалира обратимо и стабилно Li^+ йони, като обратимият му специфичен капацитет достига до 190 mAh/g при C20.

➤ За вникване в процесите, протичащи в смесени алкални електролити при работата на хибридни Li-Na йонни клетки бе проведено експериментално и теоретично моделиране. Показано е, че в смесени алкални електролити всеки Li^+ и Na^+ йон се солватират максимално без да има конкуренция между тях. На повърхността на електрода, съревнованието между Li^+ и Na^+ води до образуване на полиядрени комплекси $\text{Li}^+\text{Na}^+(\text{EC})_n$ ($n < 3$), в резултат на което повърхността на електрода се набогатява на Li^+ и Na^+ йони. Десолватацията на тези комплекси зависи от наличието на повърхностни F^- йони, образувани при взаимодействието на повърхността на електрода с електролита. Тези изследвания се провеждат заедно с учени от ФХФ-СУ.

➤ Разработен е иновативен тип електроден материал за натриево- и хибридно-йонни батерии. Материалът представлява слоест натриево-никелово-манганов оксид, в който част от никеловите йони са заместени с магнезиеви. Показано е, че магнезият стабилизира трислойната структура на оксида и влияе върху кинетиката на интеркалиране на натриевите йони. В резултат, електродният материал проявява изключителната стабилност при многократно циклиране и високи токови натоварвания.

➤ Подобро е електрохимичното поведение на катоден материал, $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$, за литиево-йонни батерии чрез заместване с 1-3 мол% от Mo^{6+} . Постигнати са следните резултати - нарастване на капацитета и скоростта на разряд, намаляване на спада на капацитета при продължително циклиране, понижаване на хистерезиса по напрежение и съпротивлението при пренос на заряд. Установен е стабилизиращ ефект на повърхностната сегрегация на молибденовите йони върху катодните материали. Изследванията са проведени в сътрудничество с учени от Израел.

➤ Постигнато е значително прогресивно увеличаване на капацитета в продължение на десетки цикли в литиево-йонни батерии благодарение на нетипично електрохимично поведение на графитни анодни материали със заоблена форма. Повърхностните и обемни структурни изследвания на този материал при циклиране с използване на HRSEM, XRD и Raman спектроскопия показваха, че структурата на графитните частици е с високи вътрешни напрежения. В резултат на циклирането тя претърпява екслоиране и разцепване поради множество трансформации при

интеркалационните/деинтеркалационните процеси, което води до увеличаване на капацитета. Изследванията са проведени в сътрудничество с учени от Израел

Материали на основата на оксиди и хидроксиди за суперкондензаторни системи;

Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали”

➤ Въз основа на *ex-situ* и *post-mortem* спектроскопски и микроскопски анализи бяха определени параметрите, които влияят върху цикличната стабилност на електродни материали, състоящи се от активен въглен получен от биомаса. Установено е, че активният въглен, характеризиращ се високо съдържание на повърхностни киселинни групи и тясно разпределение на порите по размер, проявява изключителна циклична стабилност при използването му в суперкондензатори с алкален електролит: специфичният капацитет намалява с около 2% след около 37000 цикъла.

Нанокмпозитни материали за акумулиране на водород;

Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали”

➤ В рамките на проект към ФНИ продължиха системните изследвания върху акумулирането на водород в композитни системи на основата на MgH_2 и добавки от Ni и активен въглен получен от полиолефинов восък. Изучени са съвместният ефект на двата типа добавки към MgH_2 и влиянието на количеството им върху сорбционните характеристики на съответните материали. Установено е, че количеството на Ni добавки имат по-съществена роля по отношение на кинетиката на сорбционните процеси и абсорбционния капацитет.

Интелигентни оптични системи на основата на стъкла и керамики;

Лаборатории:

„Високотемпературни оксидни системи“

„Електронна спектроскопия на твърди повърхности”

Изследванията са свързани със синтеза, термично и структурно охарактеризиране и изучаване на луминесцентните и оптични свойства на оксидни стъкла и стъклокерамики с потенциално приложение във фотониката и нелинейната оптика.

➤ Изследван е ефектът от добавянето на Nb_2O_5 към трикомпонентни $WO_3-La_2O_3-V_2O_5$ стъкла върху структурата, физичните, термичните и оптичните свойства (плътност, моларен обем, температури на застъкляване и кристализация и показател на лъчепречупване). Синтезираните многокомпонентни $WO_3-La_2O_3-V_2O_5-Nb_2O_5$ стъкла се характеризират със значително уплътняване на аморфната мрежа, висока пропускливост във видимата област (75-80 %) и високи стойности на показателя на лъчепречупване (над 2), което ги прави подходящи за оптични приложения и потенциални материали с луминесцентни свойства.

➤ Синтезирани са хомогенни многокомпонентни телуритни стъкла съдържащи Ag_2O , характеризиращи се с термична стабилност до 300 °C. Определени са физичните параметри на стъклата (плътност, моларен обем и кислороден моларен обем). Добавянето на Ag_2O модифицира структурата на стъклата и води до формирането на немостови кислородни връзки. Установени са основните структурни единици, TeO_4 , TeO_3 и NbO_6 , изграждащи аморфната мрежа, формирането на сребърни (Ag^+) кълъстери и частичната промяна на валентното състояние на телура от Te^{4+} до Te^{3+} и Te^0 .

➤ Синтезирани са безцветни, прозрачни боросиликатни стъкла, съдържащи сребро, които могат да бъдат използвани за дизайн на фотонни елементи. Определени са

термичните параметри на стъклата и е изследвана кристализационната им способност. При облъчване с Nd:YAG наносекунден лазер (дължина на вълната от 266 nm) се появява характерното кафяво оцветяване, свързано с образуване на сребърни наночастици. При облъчване с лазер с дължина на вълната от 355 nm стъклата възстановяват прозрачността си. Дифузионен растеж и редукиционни реакции са причина за наблюдаваните ефекти.

➤ Изследвани са възможностите за получаване на хомогенни стъкла дотирани с тривалентните йони на Tb, Eu или Dy в системите CaO-GeO₂-Na₂O-B₂O₃, CaO-GeO₂-Li₂O-B₂O₃ и CaO-GeO₂-Na₂O-MoO₃. Определени са областите на кристализация на Ca₂GeO₄, Li₂CaGeO₄ и Ca₅Ge₃O₁₁ фази.

➤ Получени са тънки, хомогенни ZrO₂ филми чрез спинеруване от разтвор на циркониев оксихлорид и са изследвани оптичните им свойства. Филмите са гладки, без пукнатини, с ганглиеподобна микроструктура и пропускане в УВ-видимия диапазон от около 80%. Установено е, че добавянето на полиетилен гликол (PEG) към прекурсора влияе върху фазовия състав, морфологията и оптичните свойства на филмите. Фотолуминесцентните спектри (PL) на филмите показват силно виолетово излъчване. Полимерно модифицираните филми проявяват около два пъти по-интензивна фотолуминесцентна емисия в сравнение с немодифицираните. Получените филми имат потенциал за приложение в оптиката и електрониката.

Нанокмпозитни материали с биомедицинско приложение.

Лаборатории:

„Солеви системи и природни ресурси“

„Кристалохимия на композитни материали“

„Материали и процеси за опазване на околната среда“

➤ ***Нанокмпозитни калциево-фосфатни материали с приложение в медицината.*** Синтезирани са проби от аморфен калциев фосфат (ACP) дотирани с Mg, Zn и аминокиселини в 3 реакционни среди – разтвор на симулирана тъканна течност наситен по отношение на глицин (ACPg), на аланин (ACPAl) и на валин (ACPVal). ДТА-ТГ-МАС анализът показва, че фазовата трансформация на ACP протича тристепенно: (i) отделяне на абсорбционната и хидратационна вода при 50-200°C; (ii) изгаряне на аминокиселините включени в състава на ACP при 220-470°C; и (iii) декарбонизация на аморфната фаза съпроводена с кристализация на (Mg,Zn)-β-трикалциев фосфат при 600-750°C. По-високото съдържание на Mg и Zn установено в ACPAl и ACPVal в сравнение с ACPg понижава температурата на начална кристализация.

➤ Разработени са оригинални състави за многокомпонентни титанкарбидни и боркарбидни електродни материали, които отложени върху стоманени детайли образуват свръхтвърди покрития, устойчиви на абразивно износване. Използвани са 2 метода за отлагане: газопламъчен и електроискрово нанасяне. Установени са технологичните режими на процесите и свойствата на покритията, вкл. фазов състав, дебелина, микротвърдост, трибологични характеристики. Изследванията са в рамките на съвместен проект със Селскостопанска академия и ТУ-София.

➤ Получени са смеси от ZrC, HfC, NbC чрез механохимично активиране. Посредством конвенционално синтероване се постига уплътняване на материала и подобряване на високотемпературните им свойства.

➤ Проведени са сравнителни изследвания на фазовите състави и разпределението на елементите в многокомпонентни биологични сплави на никелова и кобалтова основа. Сплавите са получени по оригинални патентовани методи и комерсиални

аналози на водещи фирми и намират приложение в денталната медицина. Получените данни показват значителни различия в структурно отношение и равномерността на разпределението на компонентите в дентални конструкции и демонстрират предимствата на сплавите, произведени по метода на праховата металургия.

➤ Съвместно с колеги от Фармацевтичен факултет на МУ-София са изследвани мезопорести силициево-оксидни частици от МСМ-41 и HMS като ефикасни носители на лекарства. Намерено е, че при нанасянето на глимепирид върху тези носители се наблюдава подобрена разтворимост, дължаща се на значително намаляване на степента на кристалност на лекарството. Нанасянето на прамипексол върху мезопорести МСМ-41 и HMS, и модифицирането с хитозан-алгинатна обвивка води до забавяне освобождаването на лекарството до 300 мин. Различната кинетика на освобождаване на лекарството се дължи на мезопорестата структура на силициево-оксидните носители. Нанесеният върху МСМ-41 ломефлоксацин показва добра биосъвместимост и намалена цитотоксичност в сравнение с ненанесеното лекарство.

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;

Лаборатории:

"Материали и процеси за опазване на околната среда"

„Кристалохимия на композитни материали“

➤ В сътрудничество с учени от ИОХЦФ са изследвани наноразмерни MeFe_2O_4 ($\text{Me} = \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) катализатори, нанесени на активен въглен, получен от въглища и отпадна биомаса, за разлагане на метанол като източник на водород. Намерено е, че получаването на смесен никел-цинков ферит в матрицата на активен въглен от отпадна биомаса се контролира от текстурните особености и редукиционната активност на въглерода. Активността на катализатора се оптимизира чрез изменение в съотношението Ni/Zn на нанесените ферити и с увеличаване на мезопорьозността на активния въглен чрез подходящ избор на отпадъчна биомаса.

➤ Изследван е ефектът на TiO_2 върху термичната стабилност и каталитичната активност на моделната система $\text{Pd}/\text{La}_2\text{O}_3\text{-CeO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, с потенциал за намаляване на емисиите от отпадни газове, съдържащи метан, пропан и бутан, при двигателите с вътрешно горене. Установено е, че модифицирането с TiO_2 води до по-висока устойчивост на катализатора в присъствие на серен диоксид. С помощта на моделни кинетични изчисления е показано, че реакцията на пълно каталитично окисление на метан най-вероятно протича по механизма на Марс-ван Кревелен с допускане на ниска скорост на десорбция на реакционните продукти. За реакцията на пълното окисление на пропан върху $\text{Pd}/\text{La}_2\text{O}_3\text{-CeO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ е предложен механизма на Лангмюр-Хиншелууд.

➤ Изяснено е влиянието на оксидите на Co , Mn и Ni в системата $\text{Pd}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ чрез теоретични и експериментални изследвания. Изследван е процесът на взаимодействие на кислород от газова фаза с повърхността на катализаторите посредством метода на термопрограмирано окисление. Получените данни потвърждават предсказаната от изчисленията по-висока скорост на хемосорбция при системите, съдържащи Co , Mn и Ni , в сравнение с тази при $\text{Pd}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

➤ Синтезирани са образци на основата на носител ZnO , модифициран с La_2O_3 , CeO_2 и Eu_2O_3 , върху които е нанесен паладий. Проведени са изследвания относно

каталитичната активност и възможността за приложение на тези материали като катализатори за пълно окисление на наситени въглеводороди. Образецът на базата на $\text{La}_2\text{O}_3/\text{ZnO}$ е определен като най-перспективен.

➤ Изследвани са каталитичните свойства на моно- и биметални катализатори на базата на кобалт и манган, нанесени върху SBA-15 и са определени реакционните условия за постигане на ефективно обезвреждане на газове, съдържащи пропан и хексан.

➤ Синтезирани и структурно охарактеризирани са нови заместени перовскити от реда $\text{Y}_{1-x}\text{Bi}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25$ и 0.30). Тестовите за каталитично окисление на метан показаха активност само на заместения перовскит със състав $\text{Y}_{0.8}\text{Bi}_{0.2}\text{FeO}_3$. Изследванията са в рамките на двустранен българо-македонски проект.

➤ Синтезирани са нови хибридни органично-неорганични перовскити със състав MASbI_3 , FASbI_3 , MABiI_3 и FABiI_3 (MA – метиламоний $[\text{CH}_3\text{NH}_3]^+$; FA – формаидин $[\text{N}_2\text{CH}_5]^+$). Установено е, че получените хибридни перовскити са изоструктурни помежду си и принадлежат към известния структурен тип на $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$. За първи път е синтезиран и определена структурата на $\text{FA}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ перовскит. Изследванията са в рамките на двустранен българо-македонски проект.

➤ Установено е влиянието на съотношението глицин-глицерол в горивната смес върху структурата, морфологията, магнитните и каталитични свойства на наноразмерен MnFe_2O_4 , получен по метода на изгаряне от разтвор. Структурните изследвания са направени в ИОНХ и всички получени образци са еднофазни кубични шпинели с размер на частиците, вариращи от 8 до 73 nm, в зависимост от съотношението в горивната смес. Резултатите показват, че структурните и морфологични характеристики на шпинелите могат да бъдат фино регулирани чрез промяна на съотношенията в горивните смеси. След каталитични тестове тези проби не претърпяват съществени промени и могат да бъдат използвани като катализатори за окисляване на въглеводороди при ниски температури. Изследванията са в рамките на съвместен проект с ИК - ИОНХ.

Оксидни тънки слоеве и нанопрахове за фотокаталитични приложения

Лаборатории:

„Високотемпературни оксидни системи“

„Електронна спектроскопия на твърди повърхности“

"Материали и процеси за опазване на околната среда"

➤ Прахове от кристалните фази MgMoO_4 и ZnMoO_4 с волфрамитен тип структура, притежаващи каталитични и луминесцентни свойства бяха синтезирани чрез предварително механохимично активиране във въздушна среда при 500 оборота/мин. При тези условия, времето за нагряване при 700 °C и 500 °C значително се съкрати в сравнение с класическия твърдофазен синтез. Успешно е синтезирана метастабилната модификация на ZnMoO_4 чрез директен механохимичен синтез във въздушна среда при 850 оборота/мин. за 5 часа.

➤ Чрез твърдофазен синтез са получени поликристални образци на съединенията Ca_2GeO_4 , $\text{Li}_2\text{CaGeO}_4$ и $\text{Ca}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$, чисти и дотирани с тривалентните йони, Tb^{3+} , Eu^{3+} и Dy^{3+} . Оптималните концентрации на дотиращите йони за всяко от изследваните съединения са определени с помощта на спектралните характеристики на образците.

➤ Получени са $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ фотокатализатори чрез механохимична обработка с различна скорост на смилане в топкова мелница и е изследвана фотокаталитичната им

активност за разграждане на багрило метил оранжево под UV-светлина. Повишената скорост на смилане води до образуване на големи порести агломерати с по-ниска специфична повърхност и изразена фазова трансформация от анатаз в рутил. Установено е, че фотокаталитичната активност намалява с увеличаване на скоростта на смилане. Изяснена е ролята на CeO_2 във фотокаталитичната система $\text{TiO}_2 - \text{CeO}_2$. Изследванията са в рамките на съвместен проект с учени от Университета в Белград.

➤ Изследвана е фотокаталитичната активност на прахове от CaTiO_3 при ултравиолетово облъчване при реакциите на разграждане на малахитово зелено и парацетамол. Установено е, че механично активиран CaTiO_3 проявява висока фотокаталитична активност при разграждането на малахитово зелено.

➤ Наноразмерни прахове от TiO_2 , дотирани с фосфор в различни концентрации са получени и изследвани чрез комбинирани нетрадиционни методи на хомогенно утаяване и последваща хидротермална активация при ниски температури. Установено е, че дотирането на TiO_2 с фосфор води до промяна на размера и разпределението на частиците, и увеличава дефектите, което благоприятства фотокаталитичната активност.

Сорбенти за пречистване на течности

Лаборатории:

"Материали и процеси за опазване на околната среда"

„Методична лаборатория по атомна спектроскопия“

„Високотемпературни оксидни системи“

➤ В сътрудничество с колеги от ХТМУ - София е изследвана ефективността на варовити глини - необработени и след термична обработка за отстраняване на йони на тежки метали от водни разтвори. Показано е, че термичната обработка води до промени във фазовия състав и текстурата, и до увеличаване на адсорбционния капацитет на глините по отношение на металните йони - Cu (II) , Zn (II) и Fe(III) . Установено е, че адсорбцията се осъществява предимно чрез йонен обмен. Избраните глини могат да се използват като ефективни адсорбенти за почистване на замърсени водни разтвори от метални йони.

➤ Материали, получени на базата на етерично-маслени растения са охарактеризирани с оглед използването им като биосорбенти за пречистване на води. При изследването са използвани съвременни инструментални методи – сканираща електронна микроскопия (SEM), диференциален термичен анализ (DTA), рентгенов дифракционен анализ (XRD), инфрачервена спектроскопия (FTIR), методът Brunauer–Emmett–Teller (BET) и др. Извършен е гранулометричен анализ и са определени текстурните параметри, термичното поведение и фазовият състав на биоматериалите. Наличието на хидроксилни, карбонилни, amino- и други функционални групи на повърхността на материалите доказва тяхната способност за свързване на метални йони. Предварителни адсорбционни експерименти за извличане на медни и кадмиеви йони из водни разтвори доказват, че изследваните материали могат да намерят приложение като ефективни и евтини биосорбенти за пречистване на замърсени с тежки метали води.

➤ Изследвано е антиоксидантното действие на католит, получен след електрохимична обработка на вода. Установено е, че католитът проявява редуционни свойства, което се дължи най-вероятно на формирането на насцентен водород. Предложена е схема на вероятния механизъм за активиране на водата при електрохимичната обработка.

➤ Проведени са първоначални изследвания за определяне ефективността на наночастици от манганов ферит (MnFe_2O_4) за почистване на моделни водни разтвори от

Cr(VI). Изучено е влиянието на някои основни параметри върху адсорбционния процес и са определени оптималните условия за адсорбция.

➤ Получени са окислени въглеродни сорбенти чрез окисляване с азотна киселина в течна фаза и са определени текстурните им параметри и съдържанието на повърхностните кислородни групи. Модифицираните материали показват повишени сорбционни възможности спрямо йоните на Тl във водна среда в сравнение с изходните въглеродни материали.

➤ Изследвани са процесите на адсорбция на Re върху два сорбента: активни въглени с микро-мезопореста структура, получени от отпадъчен хидролизен лигнин чрез активиране съответно с KOH и H₃PO₄. Активният въглен, модифициран с KOH, показва по-добри адсорбционни характеристики (адсорбция над 90%) от този, обработен с H₃PO₄.

➤ Разработена е методика за изследване на адсорбцията на полиароматни серни съединения от горива върху пиролизирани оризови люспи в статични условия. Определена е зависимостта на степента на десулфуриране от концентрацията на трите серни съединения в еднокомпонентни разтвори на моделно гориво. Определена е общата степен на десулфуриране на горивото (f_S), както и частта от нея, дължаща се на адсорбцията на всяко едно от присъстващите в системата серни съединения, ($f_{T(S)}$; $f_{BT(S)}$ и $f_{DBT(S)}$). Въз основа на получените експериментални данни е изведен и валидиран математически модел, описващ степента на десулфуриране в зависимост от началната концентрация на полиароматните серни съединения в горивото.

Адсорбенти за CO₂ и за съхранение и пречистване на съвременни горива;

Лаборатории:

"Реактивност на твърди повърхности"

"Материали и процеси за опазване на околната среда"

➤ Посредством ИЧ спектроскопия на молекули-сонди са изучени киселинно-основните свойства на различни порести метал-органични структури (MOF), които определят тяхното приложение като катализатори, адсорбенти и сензори. Изследваните системи са циркониев MOF с дикарбоксилатни лиганди, неговият аналог с аминокиселинофункционализирани лиганди и два MOF материала, скандиев и алуминиев, с пиразинов лиганд, съдържащ четири карбоксифенилови групи (синтезирани в Университетите на Сейнт Андрюс и Хановър). Установено е, че функционализирането на UiO-66 с аминокиселини слабо повлиява киселинните и основни центрове на материала. В същото време дехидроксилирането е обратимо и води до повишаване на киселинността на хидроксилните групи и поява на основни (O²⁻) и "скрити" киселинни центрове по Люис. Алуминиевата структура включва мостови хидроксилни групи, свързващи AlO₆ октаедри, което я прави подходяща за адсорбция на CO₂. По-големите скандиеви катиони формират нова структура на базата на димери Sc₂O₁₁, която при мека активация експонира каталитично активни Sc³⁺ центрове.

➤ Посредством зол-гел синтез с използване на различни прекурсори, добавки и темплейт са получени мезопорести аминокиселинофункционални хибридни материали, които са тествани като адсорбенти за CO₂. Установено е, че различните добавки влияят специфично върху хидрофобната и хидрофилната част на мицелите в реакционната смес. Определената топлина на адсорбция (над 50kJ mol⁻¹) е доказателство за хемосорбционен процес между CO₂ и аминните групи на хибридните материали.

Инфрочервена спектроскопия на повърхностни съединения и механизми на каталитични реакции;

Лаборатория "Реактивност на твърди повърхности"

➤ Обобщени са ИЧ спектроскопските изследвания с изотопно-белязани молекули върху азотните оксиди на повърхността на стехеометричен и редуциран цериев диоксид. Ревизирана е интерпретацията на спектрите и са докладвани нови съединения и интермедиати в директното разлагане и селективната каталитична редукция на азотни оксиди.

➤ С помощта на ИЧ спектроскопията са изследвани окислително-редукционните свойства и адсорбцията на азотни оксиди върху моделен катализатор за обезвреждане на азотни оксиди, Pt/CeO₂-ZrO₂/γ-Al₂O₃. Установено е, че дори при стайна температура водородът се дисоциира хетеролитично върху окислен катализатор, което води до частична редукция на CeO₂ и формиране на вода. Показано е, че водата се свързва с повърхностните хидроксилни групи и тези комплекси могат да играят важна роля при нискотемпературна адсорбция на азотни оксиди. Редуцираният при 450°C катализатор се характеризира с висока концентрация на кислородни ваканции в близост до Ce³⁺ и Pt⁰ центрове, което определя високата му активност в редукцията на азотни оксиди.

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

Лаборатории:

„Електронна спектроскопия на твърди повърхности”

„Кристалохимия на композитни материали“

➤ Чрез импулсно лазерно отлагане във въздушна среда при атмосферно налягане са получени метал-оксидни наноструктури от ZnO, с приложение за газови сензори при стайна температура. Установено е, че дотирането на наноструктурите от ZnO с благородни метали (Au, Pd, Ag), както и облъчването на повърхността на сензорните слоеве с монохроматична светлина с определена дължина на вълната води до подобряване на сензорното поведение. Увеличава се откликът на системата и се постига реакция при по-ниски концентрации на газовете. При определени условия се постига и повишена селективност към определени газове.

➤ Сравнени са структурните и морфологичните характеристики на образци от Ba_{0.5}Sr_{1.5}Zn₂Fe₁₂O₂₂, получени по сонхимичен и комбустивен метод. Установено е, че микроструктурата на поликристални прахове от Y-тип хексаферит зависи от метода на синтез. Изменения в температурните зависимости на реалната и имагинерната част на магнитната възприемчивост са по-добре изразени за пробата от сонохимичния синтез. Изследванията са в рамките на съвместен проект с учени от ИЕ-БАН.

➤ Синтезиран е прахообразен Ba₂Mg_{0.4}Co_{1.6}Fe₁₂O₂₂ материал чрез сонохимично съвместно утаяване и е изследван чрез рентгенова дифракция, мьосбауерова спектроскопия и магнитни измервания. Рентгеновите данни на образеца показват почти чиста фаза с Y-тип хексаферитна структура с незначителен примес от CoFe₂O₄. Не са наблюдавани съществени промени в параметрите на елементарната клетка на Ba₂Mg_{0.4}Co_{1.6}Fe₁₂O₂₂ в сравнение с чистото (Mg₂) съединение. Намерени са два магнитни фазови прехода, които са изместени към по-високи температури в сравнение с чистото (Mg₂) съединение. Феримагнитното подреждане при стайна температура се трансформира в спирално подреждане при около 195 K, което се счита за необходимо условие материалът да проявява мултифероични свойства. Изследванията са в рамките на съвместен проект с учени от ИЕ-БАН.

Тема В: Оползотворяване на природни ресурси и екологичен мониторинг

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

Лаборатория: „Солеви системи и природни ресурси“

➤ Изследвана е динамиката на химичните форми на преходните метали Al, Fe, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Cd и Pb в системата *почва – почвен разтвор – растителност* в два индустриално замърсени района на територията на България: Район Раднево с развита въгледобивна и въглепреработваща промишленост и Район Мъглиж с развита машиностроителна и военна индустрия. Изследванията показват, че стабилността на химичните форми е важна за усвояването и натрупването им в растенията, като този ефект намалява в реда Me-органични комплекси на фулво киселини (OrgMe) (бидентатни връзки) > OrgMeOH (бидентатни връзки) > Me²⁺ > OrgMe⁺ (монодентатни връзки) > неорганични комплекси.

➤ Оценено е екологичното състояние на повърхностни води от четири района в Западни Родопи, 4 района в комплекс „Марица изток“ и 3 района около Мъглиж, които имат различен източник на замърсяване. Установено е, че основните замърсители са Al, Mn, Zn и Pb. Mn и Zn са най-токсичните замърсители, тъй като съществуват главно като свободни Me²⁺ йони. Чрез термодинамично моделиране е прогнозирано дълготрайното химическо поведение на изследваните преходни метали при протичане на спонтанни утайтелни реакции, както и при вариране на основните фактори на средата. Различното химично поведение на Al и Mn от това на Zn и Pb, е обяснено чрез теорията за „твърди и меки Люисови киселини и основи“.

Получаване, съхранение и оползотворяване на български природни ресурси

Лаборатории:

„Солеви системи и природни ресурси“

„Методична лаборатория по атомна спектрометрия“

„Високотемпературни оксидни системи“

➤ Продължава разработването на технологии за нови продукти на основата на черноморска луга и кал. Проведено е изследване върху развитието на микробиологични форми при промяна на условията на съхранение и на средата.

➤ Изследвана е антибактериалната активност на два нови лигноцелулозни материали, на основата на отпадни продукти от производството на биоетанол и дотириани със сребро по отношение на грам-положителни и грам-отрицателни бактерии. Изследванията показват, че в процеса на обработка, Ag⁺ йони се редуцират и агломерират в струпувания от елементарно сребро върху носителите, което определя високата им антибактериална активност. Доказано е, че и двата изследвани материала могат да се използват като антибактериални продукти. Изследванията са в сътрудничество с колеги от ХТМУ-София.

➤ Определени са специфичните физикохимични показатели (катион-обменен адсорбционен капацитет; обща киселинност; рН и обменна киселинност) на сместа и компостирани с нея алувиално-ливадни почви. Определена е хранителната запасеност на сместа по отношение на N, P и K. Определено е съдържанието на хранителни микрокомпоненти (Co; Cu; Fe; Mn; Mg) във водни извлеци на трите компонента от сместа. Определено е съдържанието на общ фосфор и общ азот във всеки един от компонентите на сместа. Определено е количеството на водо- и цитраторазтворимите микрокомпоненти в сурови люспи от лимец. Получените резултати показваха, че трите

отпадни продукта от агро-хранителния сектор успешно могат да се прилагат (в комбинация или поотделно) за целево подхранване на различни култури, подобряване на въглеродния баланс и плътността на различни типове почви.

➤ Разработени са продукти за растително наторяване на основата на отпадък от производството на захарно цвекло, меласата, която притежава богат минерален състав и е отличен източник на хранителни вещества за растенията. Приготвени са два вида гранули: от смес на меласа в различни съотношения и слама от пшеница и „слонска трева“. Смесите са изсушени при $T = 80^{\circ}\text{C}$ и таблетирани. Получените гранули са компактни за съхранение и транспортиране, те са лесно разтворими във вода, което ги прави подходящ търговски продукт за използването им като растителни торове.

➤ Проведено е изследване за условията на извличане на ценните минерали от люспите от лимец, които могат да бъдат използвани за наторяване на селскостопански култури. Направени са два вида извлеци на пепел от люспи на лимец: с гореща вода и с реактив на Морган. Получените екстракти са анализирани за съдържание на Cu, Fe, Mn, Co, Na и K с помощта на пламъкова атомно абсорбционна спектрометрия. Установено е, че определяните елементи се извличат в минимална степен, тъй като в пепелта те са под формата на неразтворими оксиди. Целесъобразно би било използването на сурови смлени люспи от лимец, в които микроелементите са под формата на разтворими съединения.

➤ Продължават изследванията на адсорбционните свойства на природни C/SiO_2 хибридни материали, получени чрез пиролиза на оризови люспи по отношение на различни замърсители, с оглед на тяхното оползотворяване и превръщането на отпадъка в продукт, подходящ за прилагане в различни адсорбционни процеси, свързани с опазване на околната среда като пречистване на отпадни води.

Анализ на растителни проби и биологични материали за съдържание на есенциални и токсични елементи.

Лаборатория „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“

➤ Изследван е елементният състав на седем етерично-маслени растения с помощта на метода на електротермично изпарение, съчетано с атомноемисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма - ETV-ICP-OES, който отговаря на концепцията за „зелени“ аналитични методи. С оптимизирания метод са определени едновременно концентрациите на 26 макро-, микро- и следови елементи (есенциални, неесенциални и токсични елементи) без наличие на матрично пречене. Изчислени са стандартните отклонения (SD), относителните стандартни отклонения (RSD), границите на откриване (LOD) и границите на количествено определяне (LOQ). Изследванията са проведени в сътрудничество с колеги от Германия (TU Bergakademie Freiberg, Freiberg, Germany)

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;

Лаборатории:

„Интерметалиди и интеркалационни материали“

„Електронна спектроскопия на твърди повърхности“

„Методична лаборатория по атомна спектрометрия“

- Съвместно с учени от Македония чрез инфрачервена и Раманова спектроскопия са изучени стронциев и бариев пимелат монохидрати, които са важни зародишообразуващи агенти при получаване на изотактен полипропилен.
- Съвместно с учени от ХТМУ-София е изучена тройната диаграма на разтворимост на системата $\text{Na}_2\text{Ni}(\text{SO}_4)_2\text{-Na}_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2\text{-H}_2\text{O}$ при 25 °С. Установено е, че се образува непрекъснат ред от твърди разтвори със структура тип бляодит $\text{Na}_2\text{Ni}_{1-x}\text{Mg}_x(\text{SO}_4)_2\cdot 4\text{H}_2\text{O}$. Въз основа на анализа на ИЧ спектрите е показано, че здравината на водородните връзки нараства от богатите на магнезий съединения към богатите на никел. Установено е, че термичната дехидратация на смесените кристали се осъществява на два етапа, с образуването на междинни кристалохидрати. Над 350 °С се образуват две серии безводни съединения с различен тип структури.
- Заедно с учени от Медицински факултет към СУ продължиха изследванията върху образуването на комплекси на медни йони с лиганди на основата на дендримери и тяхното влияние върху микробиологичната им активност.
- Съвместно с учени от Португалия е изучен процеса на включване и разпределение на желязни йони в системата Mg-Al-Si-O чрез ЕПР спектроскопия. Показано е, че видът на изходната желязна сол (Fe_3O_4 или Fe_2O_3) оказва влияние върху вида на включване на желязните йони в стъклообразната система, а оттам и върху свойствата на тази система като електролит в електролиза на оксидни стопилки.
- С рентгенова фотоелектронна спектроскопия (РФС) са изследвани тънки слоеве от графен отложени върху силициеви подложки, посредством лазерна аблация с два различни режима на отлагане: непрекъснат и импулсен режим. Установено е, че независимо от прилагания режим на лазерна аблация се формира интерфейс, обогатен с sp^3 хибридизиран въглерод. Най-същественят резултат е възпроизводимото отлагане на еднослоен или няколко слоен графен, чието съпротивление е подобно на това на кристален графен. Изследванията са в сътрудничество с учени от ФФ на СУ.
- С цел получаване на графен и графеноподобни фази (дефектен графен, графенов оксид и редуциран графенов оксид) е проведено лазерно облъчване на фина суспензия, получена от разтвор на микрокристален графит в двойно дестилирана вода. С рентгенова фотоелектронна спектроскопия е определен съставът на получените въглеродни фази. Установено е, че получените колоиди, съдържат предимно редуциран графенов оксид- rGO, но в някои от тях се установява и графенов оксид- GO, графитни микрочастици, подобни на графен и някои аморфни въглеродни фази и полимери.
- С метода на РФС са изследвани слоеве от GaAsSb, легирани с азот, върху подложка от GaAs за фотоволтаични приложения. Получени са данни за локалната структура и химическото свързване на антимоновите и азотните атоми.
- С метода на РФС са изследвани многокомпонентни Ag-Te-Nb стъкла с потенциални оптични приложения. Установено е, че близкият порядък в тези стъкла се определя главно от TeO_4 , TeO_3 и NbO_6 структурни единици. Доминиращо валентно състояние на телура е 4+, но са наблюдавани и малки количества атоми в Te^{3+} и Te^0 валентни състояния.
- С метода спектроскопия на енергетичните загуби на електрони (с високо разрешение) е изследвана фононната структура на монокристал стронциев титанат (SrTiO_3). Високотемпературното нагряване води до създаване на кислородни ваканции и възникване на двумерен електронен газ в приповърхностния слой на стронциевия титанат.

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

Лаборатория „Теоретична и изчислителна химия“

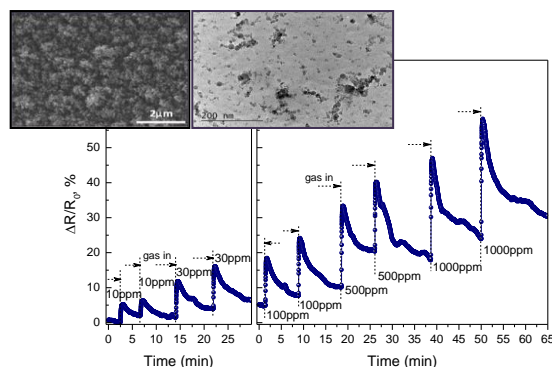
- Изследвани са молекулната структура и вибрационните (ИЧ) спектри на серия от алкилидендиамониеви хексахлоростанати $[\text{H}_3\text{N}(\text{CH}_2)_n\text{NH}_3]\text{SnCl}_6$ ($n = 3, 4, 5$) в твърда фаза чрез квантовохимични изчисления с методи на функционала на електронната плътност (DFT) при зададени периодични гранични условия. Силата на водородното свързване в комплексите и нейната зависимост от дължината на въглеродородната верига в катиона са интерпретирани посредством дължините на C-N връзките и съответстващата валентна вибрационна мода.
- Структурата и спектроскопските свойства (ИЧ, УВ-видима, ЯМР) на новосинтезирани комплекси на Zn(II) с 2-меркаптоникотинова киселина и етилендиамин, в твърда фаза, са моделирани посредством квантовохимични DFT-изчисления, на молекулно ниво и при наложени периодични гранични условия. Предсказана е сложна, полимерна структура, при която Zn(II) е петкратно координиран. Установени са зависимости между наблюдаваните спектроскопски характеристики (дължини на вълните, вълнови числа, химични отмествания), начина на свързване между метала и лигандите, и димеризацията на 2-меркаптоникотинатния анион, посредством дисулфиден мост. Получените резултати допринасят за изясняването на координационното поведение на S-, N- O-донорни групи спрямо Zn^{2+} -йони, в структурата на металопротеините.
- Моделирани са структурите на сребърни цианидни комплекси с тиуреа, диметилтиуреа и имидазолин-2-тион в твърда фаза чрез периодичен DFT метод. Оценени са факторите – електронни, енергетични и термодинамични, стабилизиращи координационния полиедър около Ag(I), както и координационното поведение на лигандите и конкурентните Ag-C, Ag-S, Ag-N and Ag-Ag свързвания. Изчисленията предсказват отслабване на силата на взаимодействие в реда $\text{Ag-C}_{\text{CN}} > \text{Ag-S}_{\text{тиуреа}} > \text{Ag-N}_{\text{CN}}$, характеризиращо се съответно с ковалентен, донорно-акцепторен и електростатичен характер. Чрез симулиране и интерпретиране на ИЧ спектрите на комплексите са установени вибрационните моди чувствителни на типа на лигандното координиране към Ag(I) и на слабите вътрешни- и междумолекулни взаимодействия в твърдата фаза.
- Изследвани са процеси на селективно каталитично окисление на метан до метанол върху медни и паладиеви катионни димери с мостово свързан кислород $[\text{M-O-M}]^{2+}$ в зеолити с методите на функционала на електронната плътност, молекулна динамика и теория на преходното състояние. В редуцирана форма, катионните димери катализират редуцията на азотни оксиди, макар и с по-ниска селективност. Проведени са системни изследвания за оптимална позиция и структура на активните центрове и е проследена реакционната координата за дисоциация на NO, $\text{NO} + \text{NO}_2$, както и за парциално окисление на метан до метанол.
- Получени са резултати за фотокаталитичната активност на сулфидни клъстери на кобалт и желязо, както и смесени кобалт-железни сулфили и техните карбонилни комплекси в редуцията на въглероден диоксид, като са изследвани двете конкурентни реакции на редуция – до формалдехид или до въглероден моноксид. Фотокаталитична активация на кобалт-съдържащите комплекси се осъществява посредством абсорбционни преходи във видимата област на спектъра и в този случай редуцията протича селективно до формалдехид.

- За инозин, който се намира в тРНК и е от съществено значение за правилната трансляция на генетичния код в нуклеобазите, е показано, че тавтомерното превръщане от оксо в енолна форма е кинетично осъществим процес, понеже изчислената скоростна константа ($k = 6.7 \times 10^1 \text{ s}^{-1}$) е достатъчно голяма, за да се генерира енолен тавтомер. Процесът на пренос на протон във водна среда протича по асинхронен съгласуван механизъм. Поради ниското съдържание на енолната форма във воден разтвор, нейното експериментално доказване би могло да стане с флуоресцентната спектроскопия.
- Показано е, че при термично или микровълново нагряване на формамид във вакуумни условия, без да се използва какъвто и да е катализатор, се получават нуклеинови бази (цитозин, аденин, хипоксантин, урацил), птерин, карбамид и някои аминокиселини (глицин, аланин, норвалин). На базата на неемпирични квантово-химични изчисления се разработва мрежа от самокатализирани химични реакции, показваща как само от формамид могат да се получат пуринови и пиримидинови бази, карбамид, птерини и някои аминокиселини.

2.1. Най-значимо научно постижение в ИОНХ

Ново поколение чувствителни газови сензори за регистриране на вредни газови емисии при стайна температура

От основно значение за качеството на човешкия живот е мониторинга на вредните газови емисии в околната среда. Основните устройства, които осъществяват контрола на вредните емисии се базират на газови сензорни слоеве и те трябва да отговарят на съвременните изисквания за селективност и чувствителност. Учени от ИОНХ изследват прилагането на високопорьозни металоксидни наноструктури от ZnO, TiO₂, SnO₂ и MoO₃, като чувствителни слоеве в газови сензори, работещи при стайна температура. Чрез проследяване на промяната на съпротивлението на изследваните слоеве под въздействието на пари на NH₃, етанол, ацетон и CO е установено: най-висок отклик на всички слоеве към пари на NH₃, най-висока чувствителност има слой от TiO₂ и най-висока реакция към ацетон и CO проявява ZnO. Дотирането на наноструктурите с благородни метали (Au-ZnO) и контролът върху повърхностната морфология и кристалната структура на материала подобрява чувствителността към определени газове. С изясняване на структурата, морфологията и състава на металоксидните наноструктури чрез XRD, TEM, SEM и XPS анализи и промяната на съпротивлението при наличие на газове е постигнато разработване на чувствителни газови сензори за пари на амоняк, ацетон, етанол и въглероден оксид.

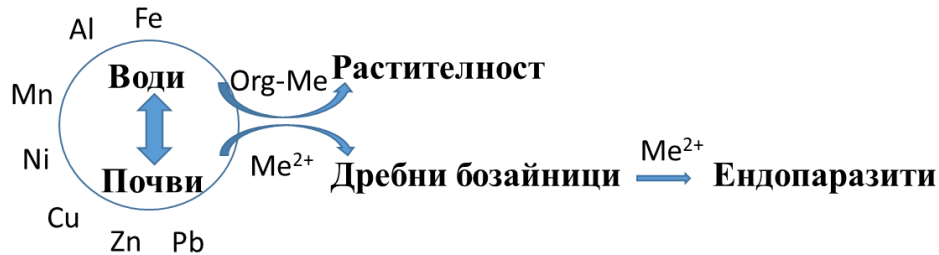


Фиг. 1 Резултати от SEM и TEM изследвания на наноструктури от TiO₂ и реакцията на сензорния слой при въздействие с пари на NH₃ с различна концентрация при стайна температура.

Ръководители: доц. д-р Геновева Атанасова, проф. д-р Пламен Стефанов
Лаборатория „Електронна спектроскопия на твърди повърхности”, ИОНХ-БАН
Изследването е в сътрудничество с учени от Институт по електроника

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение в ИОНХ

Динамика на химичните форми на преходни метали в системата природни води–почви–некултивирана тревиста растителност –дребни бозайници (диви мишки и плъхове)-ендопаразити (*Hymenolepis diminuta*).



Концентрацията и видовете химични форми на преходните метали в природни води и в почвени разтвори, както и тяхната динамика, са определящи за биоаккумуляцията им в хранителната верига. Чрез полеви изследвания, химически анализи и термодинамични моделирания в системата **природни води – почви – некултивирана тревиста растителност – дребни бозайници (диви мишки и плъхове) - ендопаразити (*Hymenolepis diminuta*)** е доказано, че различни химични форми на преходни метали са отговорни за биоаккумуляцията им в тревиста растителност и в дребни бозайници, живеещи в почвите. Наличието на метал-органични комплекси на преходни метали с фулво киселини е определящо за биоакмулирането им в растителност. В диви мишки и плъхове акумулирането се определя от наличието на свободни Me^{2+} йони, които лесно се абсорбират през кожата им. Доказана е приложимостта на използването на гостуващите в бозайника ендопаразити *Hymenolepis diminuta* като биоиндикатор за замърсяване с преходни метали поради значително по-високото биоакмулиране в тях. Актуалността на изследването се определя от необходимостта за осигуряване на екологично чисти храни, за здраве и по-високо качество на живот на населението.

Ръководител: доц. д-р Диана Рабаджиева,

Лаборатория „Солеви системи и природни ресурси“, ИОНХ-БАН

Изследването е в сътрудничество с учени от ИЕМАПАМ-БАН

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ИОНХ

Международното научно сътрудничество на ИОНХ намира израз при изпълнение на двустранни проекти към ФНИ, в рамките на междуакадемични договори и споразумения (ЕБР), при лично участие на учени във външни за ИОНХ проекти и провеждане на научни изследвания и публикуване на резултати в сътрудничество с чуждестранни учени.

През 2019 г. ИОНХ е водеща организация на 2 проекта по двустранни спогодби на ФНИ: с Русия и Индия.

Учени от ИОНХ продължават изпълнението на дългогодишни междуакадемични договори и споразумения по 3 теми с Израел, Македония и Сърбия: „Синтез, структурни и електрохимични изследвания на заместени богати на Ni слоеви материали за катоди в Li-ion батерии“ партньор - Университет "Бар Илан", Рамат Ган; „Структурно характеризирание и изследване на електричните и каталитични свойства на новосинтезирани неорганични и органично-неорганични комплексни перовскити“, партньор - Университет „Св.св. Кирил и Методи“ в Скопие; „Хетерогенно каталитична и фотокаталитична деструкция на органични и фармацевтични замърсители в

природата посредством многокомпонентни системи“, Институт по химия, технология и металургия, Център по катализ и химично инженерство - Сръбската академия на науките и изкуствата.

Трима учени от ИОНХ имат лични участия в проект на Руския фонд за научни изследвания и на ФНИ по двустранно сътрудничество с Франция и Русия.

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: Университет "Св. св. Кирил и Методий" (Скопие, Македония), Изследователския център по неутрони към Техническия Университет (Мюнхен, Германия), Университет в град Кордоба (Кордоба, Испания), Имперски колеж в Лондон (Великобритания), Университета в Атина, Университета в Прага и Чешката академия на науките, Университет в Al-Kharj, Саудитска Арабия, University Ibn Tofai, Кенитра, Мароко.

Свидетелство за международното сътрудничество на учените от ИОНХ е факта, че от общо 111 публикации през 2019 г., 29 са със съавтори от чужбина.

4. УЧАСТИЕ НА ИОНХ В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ

ИОНХ активно изпълнява **образователната програма с качествено и конкурентоспособно обучение на докторанти** в различни форми, образователни инициативи и договори за сътрудничество с други обучителни организации и висши училища на Р.България. Институтът разполага с квалифицирани учени, необходимата апаратура (максимално добра за условията в България), има опит и традиции. ИОНХ е акредитиран да подготвя докторанти по 5 докторски програми – неорганична химия, химия на твърдото тяло, химична кинетика и катализ, аналитична химия и теоретична химия. В центъра за обучение на БАН, учени от ИОНХ предлагат 7 специализирани курса. През 2019 г. успешно е защитил дисертационния си труд един докторант на самостоятелна подготовка по докторска програма „Неорганична химия“ на тема „Получаване и фазови трансформации на йонномодифицирани калциеви ортофосфати приложими като костни заместители“. Трима докторанти на самостоятелна подготовка на обучение са зачислени в ИОНХ, 2-ма по докторска програма „Теоретична химия“ и един - по „Неорганична химия“. В ИОНХ са обучавани общо **седем** докторанти по следните специалности от научно направление „Химически науки“: неорганична химия (3), химия на твърдото тяло (1), теоретична химия (2) и аналитична химия (1), от които четири докторантури на самостоятелна подготовка, две задочни и една редовна. През 2019 година, четирима отчислени докторанти (2 редовни и 2 задочни) са с право на защита. Хабилитирани учени от Института са съръководители на 5 докторантури в други научни организации - ИЕЕС-БАН, ФХФ-СУ, ХТМУ, ПУ, ИМСТ-БАН.

ИОНХ продължи през 2019 г. да осигурява добри условия за развитие на научния потенциал на младите учени. От десет докторанта, защитили дисертации в периода 2015-2019 г., осем от тях продължават научната си кариера в ИОНХ, усъвършенстват работа си със специализирана апаратура, участват активно в научни проекти на Института.

Четирима млади учени от ИОНХ изпълняват проекти по младежки научни програми към МОН. Един докторант приключи проекта си по "Програма за подпомагане на млади учени и докторанти – 2017" и той бе отличен с грамота за най-успешен проект, по Научно направление "Биоразнообразие, биоресурси и екология". Трима учени от ИОНХ успешно работят по проекти на Националната програма „Млади учени и постдокторанти“ към МОН като 2-ма са по модул Млади учени и един - по модул Постдокторанти. Млад учен ас. Нина Стоянова-Нанкова от ИОНХ е получила награда за най-добра статия на Научна конференция с международно участие "Нови индустрии,

дигитална икономика, общество - проекции на бъдещето - II", в Направлението "Биотехнологии и хранителни технологии". Ас. София Славова, с презентация на тема "Произход на живота" спечели второ място в конкурс по комуникация на науката в света "Лаборатория за слава FameLab". 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. За втора поредна година обявените конкурси за прием на редовни докторанти пропадат поради неявяване на кандидати. Това е тревожен факт и въпреки допълнителните финансови средства за докторантите в БАН, явно докторантското обучение и академичната среда са финансово и кариерно неатраaktivни за младите хора.

Учен от ИОНХ (гл. ас. Мария Ганчева) се включи в иновативен проект Учи-БАН за формиране на малки учебно-изследователски общности от ученици. Проектът е във връзка с изпълнение на договор между МОН и БАН по реализация на програмата „Образование с наука“.

ИОНХ е съорганизатор на "II-ра Школа по увод в праховата рентгенова дифракция" с участието на 27 докторанти, студенти, млади учени, и др. Националният научен форум е организиран съвместно с учени от БАН, ХТМУ и СУ

Учени от ИОНХ са участвали в комисии на докторантски изпит по специалността (8 учени) и в изпитни комисии по конкурс за академична длъжност „главен асистент“ (7 учени). Проведен е един докторантски курс към Центъра за обучение към БАН.

Тази година беше успешна за кариерното развитие и израстване **на 14 учени в ИОНХ**, назначени бяха и двама асистенти. Успешно бяха проведени 14 конкурса за избор на нови академични длъжности за:

Професори – 3: по научна специалност „Неорганична химия“ – 2 и „Химична кинетика и катализ“ - 1

Доценти – 6: по научна специалност „Неорганична химия“ – 2, „Химична кинетика и катализ“ – 2 и „Химия на твърдото тяло“ – 2.

Главни асистенти – 5: по научна специалност „Химия на твърдото тяло“ – 3, „Неорганична химия“ – 1 и „Теоретична химия“ – 1.

За поредна година бе проведен традиционният семинар за обучение на членовете на лабораторията «Солеви системи и природни ресурси» от София и Бургас (производствена база), финансиран от Вътрешен договор.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ е свързана с традиционното разработване на иновативни продукти и технологии в Лаборатория "СОЛЕВИ СИСТЕМИ И ПРИРОДНИ РЕСУРСИ" (ССПР)- София и - Бургас при ИОНХ – БАН на основата на морски води и луги, и възобновяеми селскостопански отпадъци, организиране на малки производства на медицинска натурална козметика по поръчка на бизнеса. Лабораторията организира производството на козметична серия продукти с черноморска луга в района на гр.Бургас и има за предмет на своята дейност провеждане на НАУЧНИ и ПРИЛОЖНИ изследвания, свързани с получаване и охарактеризиране на неорганични химични вещества, с разработване на технологии за тяхното производство. Извършва се тестване и пилотни изследвания на технологии за химически продукти и реактиви и за козметични и фармацевтични продукти, организиране на малки производства за проучване на пазара. Изучават се процесите на разтворимост и кристализация протичащи в редица прости и многокомпонентни солеви системи, в моделни водни системи, природни води и луги, индустриални води и др., които са теоретична основа за оптимизиране условията и за разработване на технологии за получаване на неорганични химични продукти. Термодинамично се моделират

водно-солеви системи и се прогнозируют процесите, протичащи в тях при различни условия. Изследват се и характеризират кристализиращите твърди фази, техните трансформации при различни условия. С всяка изминала година разработките на Лабораторията се увеличават по асортимент и обем, нарастват и продажбите в страната и чужбина През 2019 година са сключени 3 нови договори за продукти с марката Black Sea Stars. През ССПР-Бургас разработи и внедри технологии на 7 нови продукти с марката Black Sea Stars и организира тяхното производство.

През 2019 г. ИОНХ има регистрирани 2 нови полезни модела - „Състав за получаване на композиционни материали на основата на силициев карбид“ и „Състав за получаване на композиционни материали на основата на борен карбид“ с област на приложение военно дело и ядрена енергетика. Един подаден патент, с екип от 4 научни организации е в експертиза. През 2019 г. ИОНХ поддържа 7 действащи патента, 3 търговски марки и два патента са в експертиза.

ИОНХ има дългогодишно споразумение за проучване с фирмата Haldor Topsoe, Дания, През 2019 г. продължиха експерименталните проучвания на нови и утвърдени в практиката катализатори, производство на фирмата Халдор Топсо (Дания), с приложение за опазване на околната среда. Разработват се модели на реакционата кинетика на реакцията на пълно окисление на наситени въглеводороди в присъствие на серен диоксид и водни пари.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

6.1. Стопанската дейност на ИОНХ през 2019 г. се осъществява под формата на вътрешен институтски договор „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*. ССПР-Бургас продължава производството на продукти по наши технологии и с наши марки, поръчани от фирми от страната и от чужбина. Основни клиенти са: "РЕЛАКС БИ" ЕООД; "БИОСПЕР" ЕООД; "БЛЯК СИЙ СТАРС" ЕООД; "БЕЛАНН" ЕООД; "БЛЯК СИИ ИНВЕСТМЪНТ" ЕООД; "КОНТЕСА" ЕООД; "БИК - БЪЛГАРСКА ИЗДАТЕЛСКА КОМПАНИЯ" АД; "ДВТ-ТАЛЯ ХРИСТОВА" ЕТ; "НЮ ГРИЙНЪРИ" ЕООД; "БИОНТРА" ЕООД; "КОЗМЕТИКС БЪЛГАРИЯ ПРОФЕШЪНЪЛ" ЕООД; "ВИДЕНОВИ КО" ООД; "МЕТКОР" ООД; "ЗЕОЛИН" ЕООД. Всички Спа-центрове в страната ползват произвежданите от ССПР-Бургас продукти с черноморска луга. Получените приходи (с ДДС) са в размер на **643 386 лв**; За нуждите на ССПР-Бургас е закупено техническо оборудване на отделение „Козметика“ на стойност около 37 000 лева и са извършени строително-ремонтни дейности за поддържане на сградния фонд за около 10 000 лв. 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 сключен договор с международна фирма Халдор Топсо-Дания са получени **101 206 лв.**

От извършени анализи са получени **общо 63 823 лв.** Основни клиенти са институти на БАН, СУ, НИС към ХТМУ, а от бизнес сектора - Сенсата технолоджи ООД, Агрополихим ЕООД, Технойон ЕАД, Карбо Енерджи ЕООД, Вал Технолоджи ЕООД, Ловенщайн България Трейд ООД, Мейк България ЕООД и др.

6.2. ИОНХ има 1 действащ договор за отдаване под наем на площ от 1 кв.м. от фойето на 3 етаж за кафе-машина с фирма „Елиди 2008“ ЕООД (720 лв.).

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ИОНХ

През 2019 г. приходите на ИОНХ се формират от:

- бюджетна субсидия	1 950 297 лв.
(за работна заплата - 1 156 280 лв., 59.3 %)	
- договори с чуждестранни фирми (Халдор Топсо-Дания)	101 206 лв.
- трансфери от Фонд „Научни изследвания” по:	411 144 лв.
ДН01/6-Индия - р-л проф. Рени Йорданова –	20 000 лв;
КП06-29/7- р-л проф. Рени Йорданова –	18 000 лв;
КП06-29/10- р-л доц. Йовка Косева –	18 000 лв;
ДНТС 02-4-България-Русия - р-л доц. Димитър Радев –	12 500 лв;
ДН-14/7 – р-л доц. Диана Рабаджиева –	60 000 лв;
ДН 07/28 - р-л доц. Димитър Радев –	17 644 лв;
КП-36-Н37(ВИХРЕН) - р-л проф. Радостина Стоянова –	265 000 лв.
Разлика между получени и предоставени трансфери)	189 186 лв
- трансфери от БАН администрация и звена от:	216 667 лв.
БАН-Администрация	134 433лв;
ИМСТЦХ-БАН	23 128 лв;
ИКИТ-БАН	17 449 лв;
ИК-БАН	5 400 лв;
ИОХЦФ	9 540лв,
ИФХ-БАН	15 000 лв;
ИЕ-БАН	5 500 лв.
-предоставените вътрешни трансфери на:	27 481 лв.
ИЕ-БАН	6 070 лв;
ИОМТ-БАН	12 000 лв.
ИМК-БАН	9 000 лв.
ИК-БАН	411 лв.
Собствени приходи	710 429 лв.
- приходи от продажба на продукция (вкл.ДДС)	643 386 лв.
- приходи от извършени анализи	63 823 лв.
- приходи от продажба на бракувани активи и др.	2 500 лв.
- приходи от наеми	720 лв.

ИОНХ е получил през 2019 бюджетна субсидия в размер на **1 950 297 лв.**, като **59.29% от нея са за заплати (1 156 280 лв)**. ИОНХ има собствени приходи в размер на **1 411 965 лв.** или съотношението на собствените средствата към тези от бюджетната субсидия за 2019 г. е **42 %** към **58 %**. Общо бюджетната субсидия и собствени приходи формират бюджет от **3 362 262 лв.**

С наличната субсидия са покрити разходите за:

заплати - 1 156 280 лв;

осигуровки от работодателя 322 502 лв.;

обезщетения при пенсиониране 25 634 лв.;

за стипендии за 1 редовен докторант 6 000 лв.;

хонорари по граждански договори (за НЖ и по договори)- 46 362 лв

Разходите общо за издръжка са 514 846 лв.

за материали – 260 080 лв.,

за вода, горива и енергия – 83 349 лв, разходи
за външни услуги – 77 450 лв.,
за командировки в чужбина – 60 766 лв.
за ДМА - 123 119 лв.

По бюджетна субсидия средната годишна брутна работна заплата за 2019 е 9636 лв. (средна месечна 803.0 лв.) при планова за годината 770.83 лв. За сравнение, тя е по-ниска от миналогодишната (средна месечна 828 лв.) в ИОНХ. Благодарение на участието в мащабни проекти стана възможно през 2019 г. да бъдат изплащани и допълнителни трудови възнаграждения - общо 612 260 лв., които са 52.95% от годишния Фонд работна заплата. Така, средната брутна заплата в ИОНХ през 2019 г. реално е била 1228 лв. За сравнение, средната работна заплата за София-столица е ~1696 лв. според Националния статистически институт, т.е. РЗ в ИОНХ изостава с около 72 % от тази за София.

Плановата численост на ИОНХ-БАН към 31.12.2019 е 125 щатни бройки като реално заети са 121.

8. ИЗДАТЕЛСКА И ИНФОРМАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

ИОНХ няма собствена издателска дейност. Учените от ИОНХ имат достъп до базите данни на Scopus и на ISI Web of Knowledge.

9. ИНФОРМАЦИЯ ЗА НАУЧНИЯ СЪВЕТ НА ЗВЕНТО

Научният съвет на Института по обща и неорганична химия – БАН е избран на 25.11.2019 г. (протокол № 47/25.11.2019 г. от Общото събрание на учените в ИОНХ).

**НАУЧЕН СЪВЕТ
НА ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ,
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	професор Неорганична химия	Неорганична химия Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН
7	Михаил Йорданов Михайлов	д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
8	Виолета Георгиева Колева	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
9	Ивелина Мирчева Георгиева	д-р Неорганична химия	доцент Теоретична химия	Теоретична химия Неорганична химия	ИОНХ-БАН
10	Диана Тодорова Рабаджиева	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН

11	Кристина Костова Чакърова	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	Иванка Петрова Спасова	д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
14	Елена Здравкова Иванова	д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
15	Стефка Стоянова Тепавичарова	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
16	Ели Георгиева Григорова	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
17	Деяна Маринова Манасиева	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
18	Геновева Борисова Атанасова	д-р Химия на твърдото тяло	Доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло	ИОНХ-БАН
19	Петър Цветанов Цветков	д-р Химия на твърдото тяло	Доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Кристалохимия	ИОНХ-БАН
20	Тони Георгиев Спасов	дхн Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Химична кинетика и катализ Физикохимия Неорганична химия	ХФ-СУ
21	Весела Цакова-Станчева	дхн Електрохимия	професор Физикохимия	Електрохимия Физикохимия	ИФ-БАН
22	Никола Георгиев Малиновски	дхн Физикохимия	професор Физикохимия	Физикохимия	ИОМТ-БАН

23	Мартин Славчев Божинов	дхн Физикохимия	Професор Физикохимия	Физикохимия	ХТМУ
24	Силвия ЖивоваТодорова	д-р Химична кинетика и катализ	Професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ, Хетерогенен катализ	ИК-ИОНХ
25	Боряна Цанева	д-р Химично съпротивление на материалите и защита от корозия (по отрасли)	доцент Електротехника, електроника и автоматика	Приложна електрохимия и корозия (анодно поведение на пасивни метали, електрохимия на корозионните процеси, локална корозия, анодиране, химично и електрохимично отлагане на метали върху проводяща и диелектрична основа, наноструктурирани материали)	ТУ-София
26	Цветан Красимиров Захариев, млад учен с право на съвещателен глас	д-р Теоретична химия	гл. ас. Теоретична химия	Теоретична химия	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 2019 Г.

ИОНХ	Институт по обща и неорганична химия
МОН	Министерство на образованието и науката
НСРНИ	Националната стратегията за развитие на научните изследвания
ОП-НОИР	Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“
ЮЗУ	Югозападен Университет
ФНИ	Фонд „Научни изследвания“
РП	Работна 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
ИУРАС	Международен съюз за чиста и приложна химия
ИИХ	Институт по Инженерна химия
ФХФ	Факултет по химия и фармация
ФзФ	Физически факултет
ХТМУ	Химикотехнологичен и металургичен Университет
ССПР	Солеви системи и природни ресурси
БФ	Биологически университет
ТУ	Технически университет
СУ	Софийски университет
ПУ	Пловдивски университет
ССПР	Солеви системи и природни ресурси
ИЕ	Институт по електроника