



ОТЧЕТЕН ДОКЛАД

на ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

за **2020 г.**

Директор на ИОНХ:
/проф. д-р Радостина Стоянова/

януари 2021 г.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ИОНХ

1.1. Преглед на изпълнението на целите на ИОНХ.

Дейностите и научните изследвания в ИОНХ през 2020 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 2020 г. в ИОНХ стартира изпълнението на нов проект **“Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam)**, който ще спомогне за изграждането на партньорска изследователска мрежа върху нова значима тема в областта на химическите науки: химия на материалите за чисти технологии. С прилагане на комплексен подход на изучаване на явления на повърхността/интерфейса на твърди тела и определяне на експлоатационните характеристики на материалите се цели придобиване на нови познания за свойствата им на нано-ниво. Изследователската мрежа има потенциал да въведе ключови технологии за справяне със съвременните предизвикателства за: екологично и безопасно съхранение на енергия, каталитични/адсорбционни процеси за неутрализация на замърсители и конверсия на CO₂, стъкла и биокерамики за по-добър живот/здраве.

През 2020 г., ИОНХ продължи активно да участва в изграждането на два Национални центъра финансирани по ОП-НОИР: **Национален център за върхови научни постижения „Мехатроника и чисти технологии“** в ролята си на координатор и **Национален център по компетентност „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил)** като партньор. 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. За постигане на стратегическата цел, провежданите научни изследвания през 2020 г. продължиха в значими тематика за обществото и в изпълнение на три национални научни програми, целево финансирани от държавата: (1) **„Нисковъглеродна енергетика за транспорта и бита“**. ЕПЛЮС; (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 през 2020 г. са по теми от научно-изследователския план на ИОНХ и са проведени в рамките на **36 проекта** на Института и **13 проекта** с лично участие на учени. Резултатите от изследванията са отразени в общо **96 научни публикации**, от които **83** са в индексирани издания в международна база данни SCOPUS и Web of Science. Научните изследвания са представени на **16 научни форума** предимно у нас (заради пандемичната обстановка COVID-19) под формата на **61 представяния**. Върху научните трудове на учени от ИОНХ през 2020 г. са забелязани **3494 цитирания**, което е показател за високо научно ниво на публикуваните изследвания. През 2020 г. ИОНХ, заедно с СУ-ФХФ организира ЮБИЛЕЙНА НАУЧНА СЕСИЯ посветена на 100 – годишнината от рождението на Академик ГЕОРГИ БЛИЗНАКОВ, на която бяха представени **92 постера** (онлайн) и отпечатан сборник с материали (ISBN 978-619-245-072-4). По случай 60 години от създаването на Институт по обща и неорганична химия, съвместно с Институт по органична химия с Център по фитохимия бе направен филм за двата най-големи химически института към Българската академия на науките.

Задържането на квалифицирани учени и създаване на условия за кариерно развитие, както и привличане на млади специалисти е приоритетна политика в ИОНХ.

През 2020 г. **трима докторанти са защитили в ИОНХ** дисертационния си труд и са придобили научната и образователна степен „доктор“. Успешно е проведен **един конкурс за главен асистент**. Назначени са общо пет млади изследователи.

През 2020 г. благодарение на засиленото проектно и програмно финансиране продължи подобряване на материално–техническата база на Института: обновени са няколко лаборатории, закупени са нови апаратури (рентгено-флуоресцентен спектрометър с пълно вътрешно отражение, лиофилизатор, ротационен вакуум изпарител, модулна установка за измерване на луминесцентни свойства, бързо-сканиращ ИЧ спектрометър с Фурие трансформация, газов хроматограф, ИЧ реакторни клетки и др.), както и лицензи за софтуерни програми – Gaussian16 и Turbomole. При това се увеличават възможностите за извършване на уникални научни изследвания. Постигнатите резултати през 2020 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 Специфична цел 9 *Разширяване на участието на българската научна общност в европейското изследователско пространство и разширяване на международното научно сътрудничество* и Специфична цел 1 *Осигуряване на висока квалификация и ефективно кариерно развитие на учените, основано на високо ниво на научните изследвания на НСРНИ в РБ* и благодарение на активната си научна дейност ИОНХ участва в **Национална програма „Европейски научни мрежи“** с проект “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam). Основна цел на проекта е повишаване на научно-изследователския и технологичен потенциал на учените в ИОНХ и привличане на нови млади учени в областта на химия на материалите за чисти технологии чрез изграждане на научна мрежа с три водещи научни организации: Имперски колеж в Лондон (Великобритания), Институт за приложни материали – системи за съхранение на енергия към Технологичния институт в Карлсруе (Германия) и Институт по материалознание при Университета на Севиля (Испания).

В изпълнение на компонент от НСРНИ в РБ за *концентриране на научната инфраструктура и изследователския капацитет* в приоритетните области на ИСИС като Мехатроника и чисти технологии, съвременни енергийни източници, опазване на околната среда, екологичен мониторинг и оползотворяване на суровини и биоресурси, ИОНХ участва в:

- **Национален център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“** 2018 – 2022 г. по ОП-НОИР (трета година) като координатор.
- **Национален Център по компетентност „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил)** 2019-2023 г. по ОП-НОИР (втора година) като партньор.
- **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-ЕСССЕЛ „Съхранение на енергия и водородна енергетика“ за обновяване, разширяване и поддържане на научната апаратура в ИОНХ.
- **три национални научни програми към МОН** (трета година): „Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта“ ЕПЛЮС, по Компонент 1 “Съхранение и преобразуване на възобновяема енергия” и Компонент 3 “Ефективни методи за улавяне и оползотворяване на CO₂”, „Здравословни храни за силна

биоекономика 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)“.

➤ изпълнение на **20 научни проекта по Фонд „Научни изследвания“ – МОН**, свързани с фундаментални изследвания по приоритетни теми заложи в НСРНИ в РБ и на ИСИС. В **9** проекта, **ИОНХ е водеща организация**. **11** учени са включени с лично участие в проекти на ФНИ и **2-ма** учени участват в други проекти.

➤ **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 (втора година).

➤ **Националната научна програма „Млади учени и пост-докторанти“** към МОН – **4 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 доставяне на нова апаратура за обучение на висококвалифицирани специалисти и финансови стимули за тяхното задържане и развитие, висока компетентност и оборудване за подпомагане на високотехнологични производства и бизнеса (автоматичен газ-сорбционен анализатор за определяне на специфична повърхност, размер на пори с напълно интегрирана опция за хемисорбция; диференциален сканиращ калориметър с широк температурен интервал). В рамките на проект НИ СЕВЕ бяха модернизирани и подобрени условията на работа.

✓ 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.

С цялостната си научноизследователска дейност ИОНХ интегрира науката в България в Европейското изследователско пространство в изпълнение на НСРНИ 2020.

В съответствие с *Политика 4.6. „Стимулиране на приложни научни изследвания“*, **приложните изследвания** в ИОНХ са свързани главно с оползотворяване на природни ресурси, в частност морска луга и разработване на технологии за производство на козметика и медицинска козметика (Лаборатория ССПР).

Развитието на научния потенциал и поддържане на високо научно ниво на изследванията са следващите цели на ИОНХ в съответствие дейност 1.3. от НСРНИ. През 2020 г. **5 млади специалисти и учени** са привлечени на работа в ИОНХ по проекти, от които двама са на щатни позиции. В рамките на компонента 2 от бюджета на ИОНХ се извършва диференцирано заплащане на членовете на Института в зависимост от постигнатите резултати През 2020 г. мобилността бе силно ограничена заради пандемичната обстановка и наложените ограничения. Реализирани са само **19** командировки основно в страната за участие в работни срещи.

Съгласно хоризонтална дейност 2. *Синхронизирани изменения в нормативните актове, свързани с изпълнението на стратегията*, през 2020 в ИОНХ бяха актуализирани някои нормативни документи с приемане на изменения в Правилник за прилагане на ЗРАСРБ в ИОНХ, на нова атестационна карта, на нормативни документи за спазване на COVID-19 пандемични мерки. Благодарение на добрата организация, закупената платформа WEBEX и умелото използване на възможни онлайн средства, изпълнението на проектите и планираните изследвания в ИОНХ беше успешно.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности

За трета 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” ЕПЛЮС, 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 ЕПЛЮС** 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-базирани 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 биоекономика 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 приложения, на биоматериали с приложение в ортопедията и денталната медицина в отговор на грижи за хората. Получените резултати върху разработените материали и моделирания за оценка на природни води и почви са публикувани в реномирани списания и са видими за научната общност. В полза за обществото в персонален и бизнес план са разработените технологии за оползотворяване на природни ресурси, в частност морски луги и доставяне за пазара продукти за козметика/медицинска козметика.

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. През 2020 г. в ИОНХ се обучават докторанти на ХТМУ, ФХФ-СУ, ПУ ИЕЕС-БАН, ИЕ-БАН и ИМСТ с ЦХА – БАН в рамките на 6 съвместни докторантури. В Института е подготвена една дипломна работа за бакалавърска степен на студент от ФХФ-СУ, защитена с отличие.

Обществени изяви за популяризиране на научните постижения.

➤ Участие на учени от ИОНХ в Софийски фестивал на науката 2020 г.

- организиране и представяне на щанд Нови материали от Институт по обща и неорганична химия;

- провеждане на Работилница "Светлина и молекули" с ученици и студенти (водещ гл. ас. д-р Цветан Захариев).

- Участие в Европейска нощ на учените с Медийна изява (видео): дигитална разходка из лабораториите на Института по обща и неорганична химия при БАН. https://www.facebook.com/watch/live/?v=421492532528184&ref=notif¬if_id=1606494612559102¬if_t=live_video_explicit
- Интервю на проф. д-р Пламен Стефанов „Какво прави института за науката и обществото и защо е важно да развиваме наука в България“ пред изданието „Българска наука“.
- Участие в предаване „Тази сутрин“ на btv, „Експерти: Използваният от полицията газ: Остава неясна съставката на газа“ (ас. Нина Стоянова-Нанкова).
- Научно-популярна статия „Нобеловата награда по химия 2019“ списание Наука (проф. д-р Радостина Стоянова).
- Ежегодно връчване на наградата „Проф. Христо Баларев“ за изявен млад учен в областта на неорганичната химия“, с подкрепа на номиранияте участници от Научния съвет на ИОНХ.
- Интервю по БНР радио на Пенчо Бейков.

В резултат на високо обществено признание през 2020 г. учени от ИОНХ бяха удостоени със следните награди:

- Голямата награда за наука „Питагор“ на чл. кор. проф. дхн К. Хаджииванов за цялостен принос в развитието на науката.
- Орден „Св. св. Кирил и Методий“ – огърлие на проф. дхн Христо Баларев за особено значими заслуги в областта на общата и неорганична химия.
- Учен от ИОНХ, чл. кор. проф. дхн Константин Хаджииванов е сред 25-те учени от БАН, които са в първите два процента топ учени в света, съгласно класация на Станфордския университет. Още повече той заема най-високата позиция 53-та в областта Физикохимия.
- В деня на народните будители двама учени от ИОНХ получиха награди от БАН, чл. кор. Константин Хаджииванов с награда за съществен индивидуален принос за оформяне на Н-индекса на БАН и проф. Михаил Атанасов с грамота за значим индивидуален принос за оформяне на Н-индекса на БАН.

1.4. Взаимоотношения с други институции

Сътрудничеството между учени от ИОНХ, университети и други институти в България се осъществява при изпълнение на :

- два проекта по ОП-НОИР, **Национален център за върхови постижения „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 и **Национален център по компетентност Хитмобил** с партньори 6 института на БАН и Югозападен Университет
- научни инфраструктурни, национални научни програми и съвместни проекти на ФНИ (18) с партньори: Висши училища (ФХФ-СУ, ХТМУ-София, ФзФ-СУ, Селскостопанска академия - Институт по почвознание, агротехнологии и защита на растенията, МГУ-София, ТУ-София) и Институти на БАН (ИЕЕС, ИОХЦФ, ИФХ, ИП, ИЕ, ИМК, ИОМТИ, ИКИТ, ИМСТ, ИЕМПАМ, ИГ)
- многобройните съвместни публикации.

Изследванията са основно в направления енергийни ресурси, енергийна ефективност, нанонауки, нови материали и технологии.

През 2020 г. международното сътрудничество на ИОНХ бе засилено и разширено с три водещи научни организации от Англия, Германия и Испания в рамките на проект Европейски научни мрежи TwinTeam.

Участие в експертни органи. Учени от ИОНХ участват в експертни органи и в експертизи основно 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. Е. Жечева), Постоянна Научно Експертна Комисия по Химически науки (ФНИ-МОН) (член, проф. Н. Трендафилова), Временна Научно Експертна Комисия по Химически науки (ФНИ-МОН) (доц. И. Спасова), Жури в конкурс за докторска стипендия на Фондация Карол Знание (проф. Р. Стоянова), Експертна група по процедура за програмна акредитация на докторска програма „Физикохимия” от професионално направление 4.2. ХИМИЧЕСКИ НАУКИ в Медицинския университет – Пловдив (докторант Д. Кичукова) и една експертиза към Българска служба по акредитация за Оценка на Лаборатория за изпитване към Министерство на отбраната (д-р Галя Генчева).

Участия на учени от ИОНХ в съвети и комисии. Национален координационен съвет по нанотехнологии, Национален комитет към Международен съюз за чиста и приложна химия (IUPAC), Division VI, Chemistry and the Environment; IUPAC Division V, Analytical Chemistry, Управителен съвет на Българско кристалографско дружество, национален делегат на Division of Computational and Theoretical Chemistry на European Chemical Society, Комисия по прахова дифракция на Международния съюз по Кристалография, Експертен съвет за Защита на населението при бедствия и аварии 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), Обществен съвет на гр. Бургас за опазване на Атанасовско езеро, Комисия от представители на институти на БАН за оценка на замърсяването на почвата, водите и въздуха в землището на с. Хаджидимитрово и с. Дражево от регионалното депо за неопасни битови отпадъци – гр. Ямбол и др.

Рецензии и становища по процедури. Учени от ИОНХ са ценени и търсени експерти и през 2020 г., 13 учени от тях са изготвили 26 рецензии и становища по процедури за научни степени и академични длъжности към ИОНХ, Институти на БАН (ИЕЕС, ИМК, ИОХЦФ, ИФХ, ИК, ИМСТ, ИП), ФХФ-СУ, ХТМУ-София, вкл. една рецензия на дисертация в чужбина. Изготвени са 3 рецензии на дипломни работи за магистърска степен на студенти от ХТМУ и ФХФ-СУ, 12 рецензии по проекти на ФНИ и други научни организации и 132 анонимни рецензии на статии за специализирани списания (от 17 експерти на ИОНХ).

Международни мрежи и организации. ИОНХ участва в Европейска научна мрежа с проект “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam). 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 каталитици, Съюз на химиците в България, Съюз на учените в България, Сдружение на олимпийските отбори по природни науки;

- *редакционни колегии*: Chemical Engineering Journal (IF = 10.7) (заместник главен редактор), Materials, Open Engineering, Recent Patents on Materials Science, Current Smart Materials, Asian Journal of Nanosciences and Materials; International Journal of Advances in Chemistry;

- *организационен комитет* на научен форум „ЮБИЛЕЙНА НАУЧНА СЕСИЯ“, посветена на 100 – годишнината от рождението на Академик ГЕОРГИ БЛИЗНАКОВ.

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) и български университети (ХТМУ, НИС-СУ). За нуждите на бизнеса са направени анализи за сертифициране на продукцията, контрол на суровини и технологични процеси за фирмите Сенсата Технолоджи ЕООД, Алианс България ЕАД, Зеолин ЕООД, Мелексис ЕООД, Октопод инвест холдинг ЕАД, МЦ Уроелит.

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

- Разработен е метод за получаване на монолитен катализатор на базата на системата $Pd/La_2O_3-CeO_2-Al_2O_3$, нанесен върху индустриален носител за работа в реакции на окисление на летливи органични съединения в отпадни промишлени газове.
- Изгражда се експериментална система за изследвания върху стабилността при продължителна работа на катализатори в присъствие на серен диоксид и водни пари с цел разработване на системи за почистване на газове, съдържащи метан, пропан и бутан.

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 2020 г. „Лаборатория по солеви системи и природни ресурси“ - Бургас разработи и внедри технологии на 9 нови козметични продукта и организира тяхното производство. Разработените нови продукти за козметиката/медицинската козметика са по поръчка на бизнеса. През 2020 г. са сключени 3 нови договора с чуждестранни партньори за продукти с марката Black Sea Stars: ФОР ПАВЕЛКО О.О. - Киев, Украйна, SIA ANIJA-Рига, Латвия, Sobrone s.r.o. - Nitra, Slovakia. 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.

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 четири Национални научни програми на МОН като дейностите и резултатите за 2020 г. се представят в цялостния отчет на програмите към МОН.

Проекти по Национални научни програми на МОН	Водеща организация	Координатор от страна на ИОНХ
„Европейски научни мрежи“ с проект “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти	ИОНХ	проф. д-р Радостина Стоянова

технологии“ (TwinTeam)		
„Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта” ЕПЛЮС	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 2020

2. Резултати от научноизследователската дейност през 2020 г.

Основните резултати от научно-изследователската дейност на Института следват темите и задачите от научно-изследователския план на ИОНХ 2017-2020 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

Тази тема се разработва от учени от Лаборатории „Интерметалиди и интеркалационни материали”; „Електронна спектроскопия на твърди повърхности” и „Кристалохимия на композитни материали“

➤ Предимствата на съвместната интеркалация на Li^+ и Mg^{2+} пред тази на единичните йони бе демонстрирана чрез три типа оксиди: смесени магнезиево манганови шпинели, MgMn_2O_4 , слоести манганови оксиди, Mn_5O_8 , и орторомбични натриево-титановите оксиди, $\text{Na}_2\text{Ti}_2\text{O}_5$. От тях, най-висок специфичен капацитет и стабилност при многократно циклиране проявява слоестият оксид Mn_5O_8 . Натриево-титановите оксиди се характеризират с нисък потенциал на интеркалация на йоните, като най-ефективните двойки от йони, подходящи за съвместна интеркалация са: $\text{Li}^+, \text{Na}^+ > \text{Li}^+, \text{Mg}^{2+} > \text{Na}^+, \text{Mg}^{2+}$. Тези свойства позволяват слоестият Mn_5O_8 и орторомбичен $\text{Na}_2\text{Ti}_2\text{O}_5$ да се използват като положителни и отрицателни електродни материали за хибридни метал-йонни батерии.

➤ Приложението на натриево-йонните батерии при машабно съхранение на енергия зависи критично от разработването на нови класове електродни материали, способни да функционират при температури по-високи от стайната. Демонстрирана е нова разработка за получаването на слоести оксидни електродни материали с оптимизиран състав, структура и електрохимични свойства при температури над стайната (т.е. 40 °C). Най-добри електрохимични свойства при 40 °C се наблюдават при оксиден електрод, циклиращ в натриево йонна течност като електролит. Предимствата на йонните течности пред конвенционалните циклични карбонатни електролити по отношение на оксидни електродни материали се състоят в намален първи необратим капацитет и понижена повърхностна реактивоспособност спрямо оксида.

➤ Заместването на никелови йони с магнезиеви в слоести натриево никелово-манганови оксиди води до значително подобряване на цикличната им стабилност при високи температури в хибридни литиево-натриево йонни батерии. Електрохимичните характеристики на оксида в хибридните Li/Na клетки са по-добри в сравнение с тези в

единични натриево-йонни клетки, което се дължи на протичане на реакция на съвместната интеркалация на Li^+ и Na^+ йони.

➤ С метода на рентгеновата фотоелектронна спектроскопия са изследвани повърхностните химични състави на слоести оксидни електродни материали от типа $\text{P}_3\text{-Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/2}\text{Mn}_{1/2}\text{O}_2$ и $\text{P}_3\text{-Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mg}_{1/6}\text{Mn}_{1/2}\text{O}_2$. Последните са получени чрез селективно заместване на Ni^{2+} йоните с Mg^{2+} . Определени са валентните състояния на наблюдаваните химически елементи и дебелините на различните повърхностни слоеве, използвайки измененията на техните концентрации (в сътрудничество с проф. д-р Р. Стоянова).

➤ Повърхностните химически изменения при интеркалацията на Li^+ и Na^+ йони в електродните материали $\text{P}_3\text{-Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mg}_{1/6}\text{Mn}_{1/2}\text{O}_2$ са подробно изследвани с рентгенова фотоелектронна спектроскопия, което спомага за разбирането на поведението на хибридните Li/Na батерии при високи температури (в сътрудничество с проф. д-р Р. Стоянова).

➤ Научно предизвикателство при разработването на хибридни метало-йонни батерии е да се идентифицират електролити, които осигуряват ефективен трансфер на няколко вида интеркалиращи се йони. Съвместно с учени от ФХФ-СУ бяха моделирани солватационните свойства на смесени йонни електролити, чрез изучаване на енергетиката и структурата на хомо- (Li^+/Li^+ , Na^+/Na^+ и $\text{Mg}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$) и хетеро- (Li^+/Na^+ , $\text{Li}^+/\text{Mg}^{2+}$ и $\text{Na}^+/\text{Mg}^{2+}$) двойки от катиони с различен брой молекули на етилен карбонат в полярно и неполярно обкръжение. Независимо от простотата на моделите, получените данни дават възможност да се разбере добре установения необясним експериментален факт, че смесените Li-Mg (или Na-Mg) електролити превъзхождат единичните електролити в хибридните батерии.

➤ Чрез заместване с магнезиеви йони са подобрили електрохимичните характеристики на натриево манганов фосфо-оливин NaMnPO_4 като положителен електрод в натриево-йонна и хибридна батерия. Заместените с магнезий фосфо-оливини проявяват по-висока електронна проводимост ($2.5 \times 10^{-6} \text{ S/cm}$), което обуславя постигането на добри електрохимични свойства при тях. Установено е, че интеркалацията на натрий в заместените фосфо-оливини протича по многофазов механизъм. От натриевите електролити, най-подходящ по отношение на електрохимичните свойства на фосфо-оливините е 0.5 М разтвор на NaTFSI в PC. За първи път е разработена пълна йонна клетка с електроди Mg-заместен натриево-манганов фосфат и $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ с приемливо електрохимично поведение.

➤ Изследвани са електрохимичните свойства на тунелен-тип натриево-железни фосфати с разнообразни състави (алуаудит, насикон, марицит и др.) в различни електролити. Получени са нови данни за структурната им стабилност при механохимична обработка, както и за механизма на интеркалация на натриевите и литиеви йони при електрохимично циклиране. Въз основа на сравнителния анализ е подбран най-подходящият състав като електроден материал за литиеви и натриево йонни батерии.

➤ Уточнени са оптималните условия за синтез на монофазни образци на системите Li-Ni-Fe-Mn-O ($\text{Ni} = 0.85$) и Li-Ni-Cr-Mn-O ($\text{Ni} = 0.85$). Структурните изследвания показват, че фазите кристализират в слоест тип хексагонална структура. Параметрите на елементарната клетка и на двете фази са по-високи от тези на кобалт-съдържащите им аналози. Уточнена е степента на заселване на никела в литиевите позиции, която при желязосъдържащите проби е сравнима с тази на кобалтовите, докато при хром съдържащите проби е по-висока.

Материали на основата на оксиди и хидроксиди за суперкондензаторни системи

По тази тема работят учени от Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали”

- За първи път са синтезирани и охарактеризирани твърди разтвори на основата на литиеви и натриеви мангано-никелови фосфати с оливинова ($\text{LiMn}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{PO}_4$) и марицитна структура ($\text{NaMn}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{PO}_4$). Съвместно с учени от ИЕЕС-БАН фосфатите са изследвани като електроди за хибридни суперкондензатори и първоначалните данни показват приемливи специфични капацитети с висока стабилност при многократно циклиране.
- Показано е, че капацитивните характеристики на получените от биомаса въглеродни материали, използвани като електроди в симетрични суперкондензатори, се подобряват в зависимост от използвания основен алкален електролит, следвайки реда $\text{NaOH} < \text{LiOH} < \text{KOH}$. Въз основа на *ex-situ* и *post-mortem* рентгеново-фотоелектронни анализи бе установено, че този ред се определя основно от повърхностното взаимодействие между функционалните групи на въглеродните материали и електролитите.

Наноконпозитни материали за акумулиране на водород

Темата се изпълнява от учени от Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали”

- Изследвани са сорбционните характеристики по отношение на водород на композити между MgH_2 (80 мас. %) и добавки от Ni (5 мас.%) и активен въглен от черупки от орехи (5 мас.%). Фазовите и морфологични промени, настъпващи в образците след хидриране са проследени чрез *ex-situ* ТЕМ и рентгенов фазов анализ. Установен е най-подходящият състав за акумулиране на водород.
- Синтезирани са магнезиево-никелови хидриди (Mg_2NiH_4), в които Ni е частично заместен с V. Заместените хидриди с добавки от активен въглен, получен от кайсиеви черупки е тестван като отрицателен електрод в Ni/MH батерии. Установено е, че първоначалният капацитет достига сравнително високи стойности (около 400 mAh/g), но неговата стабилност при циклиране е все още незадоволителна.

Интелигентни оптични системи на основата на стъкла и керамики

Учени от Лаборатории „Високотемпературни оксидни системи“; „Електронна спектроскопия на твърди повърхности” и Кристалохимия на композитни материали“ са ангажирани в осъществяването на тази задача:

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

- Синтезирани са многокомпонентни прозрачни обемни стъкла в системата $\text{WO}_3\text{-La}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_5\text{-Nb}_2\text{O}_5$ дотирани с активния Eu^{3+} йон в различно количество ($\text{Eu}_2\text{O}_3 = 0.5, 1, 2, 3, 5 \text{ mol}\%$). Стъклата се характеризират с интензивна червена емисията при 617 nm и са подходящи обекти за разработване на оптични материали. Установена е зависимостта на наблюдаваната емисия от състава, структурата и физикохимичните параметри. Eu^{3+} йони в ниски концентрации ($\text{Eu}_2\text{O}_3 = 1\text{-}2 \text{ mol}\%$) модифицират основно

боратните структурни единици. При по-високо съдържание на Eu_2O_3 (3 и 5 mol%) европият, изпълнява ролята на „свързващ агент“, като участва във формирането на смесени мостови връзки (Eu-O-B; Eu-O-Nb; Eu-O-W) между различните структурни единици. Установено е, че стъклата, съдържащи Eu_2O_3 се характеризират с по-добра термична стабилност и по-висока от плътност в сравнение с чистите стъкла.

➤ Получени са стъкла от системата $\text{CaO-GeO}_2\text{-Li}_2\text{O-B}_2\text{O}_3\text{-Re}_2\text{O}_3$ ($\text{Re}^{3+} = \text{Tb}^{3+}, \text{Eu}^{3+}, \text{Dy}^{3+}$). Изследвани са областите, където след термично третиране на стъклата кристализира като основна, една от фазите Ca_2GeO_4 , $\text{Li}_2\text{CaGeO}_4$ или $\text{Ca}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$. Избраните три състава бяха дотирани с различни концентрации на трите активни йона. Определени са условията на термично третиране на стъклата за получаване на стъклокерамика съдържаща една от изброените кристални фази. Установени са основните структурни групи изграждащи аморфните мрежи - BO_3 , BO_4 , GeO_4 , CaO , LiO_4 и формираните връзки между тях (B-O-Ge). Дотирането с редкоземните йони води до трансформация на BO_4 групите в BO_3 и до разкъсване на връзката B-O-Ge.

➤ Чрез емисионните спектри и спектрите на възбуждане бяха определени оптималните концентрации на допанта за всеки състав. Така за стъклата, от които кристализира фазата Ca_2GeO_4 оптималната концентрация на Tb^{3+} е 7 ат%, на Eu^{3+} - 3 ат% и на Dy^{3+} - 2 ат%. За стъклата, от които кристализира фазата $\text{Li}_2\text{CaGeO}_4$ оптималната концентрация на Tb^{3+} е 2 ат%, на Eu^{3+} - 5 ат% и на Dy^{3+} - 3 ат%. За стъклата, от които кристализира фазата $\text{Ca}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$ оптималната концентрация на Tb^{3+} е 4 ат%, на Eu^{3+} - 5 ат% и на Dy^{3+} - 4 ат%.

➤ Получени са зол гел слоеве от ZrO_2 върху силициеви подложки - недотирани и дотирани с Gd . Тънките филми са хомогенни, със средна дебелина 115 nm и индекс на пречупване (n) 1.83 и средна грапавост от 0.8 nm. Рентгеновият дифракционен анализ (XRD) разкри наличието на различна смес от моноклинни и тетрагонални ZrO_2 поликристални фази, в зависимост от добавката, всички с наноразмерни кристалити. Установено е, че концентрацията на добавката от Gd влияе значително върху оптичните показатели и фотолуминесцентните свойства (PL). Недотираните филми показаха широко виолетово-синьо PL излъчване, докато добавянето на Gd^{3+} йони доведе до нови тесни ивици, както в UV-B, така и във видимата област. Интензивната емисия при 313 nm, може да намери приложение в медицината за лампи при лечението на различни кожни заболявания.

➤ С методите на рентгенова дифракция и сканираща електронна микроскопия са изследвани графитови образци със стъкловъглеродно покритие след престой в космоса. Установено е, че продължителният престой в открития космос (28мес.) не води до изменение в структурата на стъкловъглерода и подложката от плътен въглерод. Проведеното изследване със сканираща електронна микроскопия, показва следи от драскотини в резултат от сблъсъци с микрометеорити. Това потвърждава високите експлоатационни качества на стъкловъглерода като материал за сензори.

Нанокмпозитни материали с биомедицинско приложение.

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Солеви системи и природни ресурси“, „Материали и процеси за опазване на околната среда“, „Кристалохимия на композитни материали“

Нанокompозитни калциево-фосфатни материали с приложение в медицината.

➤ Синтезирани са серия тройно дотирани (с Mg^{2+} , Zn^{2+} и Sr^{2+} йони) аморфни калциевофосфатни прекурсори, с постоянни количества на Mg^{2+} и Zn^{2+} йони (съответно 14 и 3 мол. %) и променящи се количества на Sr^{2+} йон (от 1 до 10 мол. %). Синтезите са извършени в среда на глицинов буфер (pH 8) по метода на непрекъснато утаяване, при стайна температура и интензивно разбъркване. Резултатите сочат, че цялото количество стронций и цинк е включено в състава на получените прекурсори, за разлика от Mg -йони, чието количество е 70-90%. Тази разлика се обяснява с образуването на стабилни $Mg(H_2O)_6$ комплекси в разтвора.

➤ Изследвана е кинетиката на температурната фазова трансформация на двойно дотирани (с Mg^{2+} и Zn^{2+} йони) и тройно дотирани (с Zn^{2+} , Mg^{2+} и Sr^{2+} йони) аморфни калциево-фосфатни прекурсори. Рентгенофазовият анализ показва, че във всички случаи накалените на 400 °C прекурсори остават аморфни. Независимо от съдържанието на дотиращите йони, още при 600 °C се получава йонно-модифициран β -трикалциев фосфат.

➤ Съвместно с Фармацевтичния факултет на МУ-София е изследвана възможността за използване на хитозан-алгинатни наночастици за стабилизиране на доксорубицин срещу разграждане. Намерено е, че капсулирането на доксорубицин в хитозан-алгинатни наночастици води до подобрена стабилност на лекарството, повишена цитотоксичност при резистентни лимфомни клетки и намаляване на кардиотоксичните ефекти, а наблюдаваните защитни ефекти вероятно са резултат от антиоксидантните свойства на хитозан-алгинатните наночастици.

➤ Патентно защитени са оригинално получени състави за многокомпонентни титанкарбидни и боркарбидни електродни материали, подходящи за газопламъчно и електроискрово нанасяне на свръхтвърди покрития върху стоманени детайли, подложени на абразивно износване. Изследвани са технологичните режими на процесите и свойствата на покритията, вкл. фазов състав, дебелина, микротвърдост, трибологични характеристики. Резултатите са обобщени в монография.

➤ Изследвани са условията за високотемпературно уплътняване и свойствата на керамики на основата на SiC в присъствие на активиращи добавки от YAG.

➤ Посредством механично активиран термичен синтез е получен наноструктуриран купрориваит ($CaCuSi_4O_{10}$), с възможности за приложения в биомедицината, биосензорната техника, телекомуникация и др. области.

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;

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите "Материали и процеси за опазване на околната среда", „Кристалохимия на композитни материали“, "Реактивност на твърди повърхности"

➤ Изследвани са свойствата на моделната система $Pd/La_2O_3-CeO_2-Al_2O_3$, модифицирана с ZrO_2 с приложение за намаляване на емисиите от отпадни газове,

съдържащи метан. Установено е, че паладият в каталитично активната фаза е под формата на Pd^0 , Pd^{2+} и Pd^{4+} , а реакцията протича по окислително-редукционен механизъм. На базата на кинетичен модел са определени параметрите на инхибиращия ефект на водните пари. Установено е, че присъствието на H_2O и SO_2 води до образуване на повърхностен $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$, което изисква допълнителни изследвания относно начините за регенерацията на катализатора в присъствие на сярата – съдържащи съединения.

➤ Установено е, че при редукция на NO с CO активността на меднооксидни катализатори, нанесени върху мезоструктурирани алуминиево-въглеродни композити с различно съотношение Al/C може да бъде регулирана чрез промяна на състава на композитния носител, благодарение на хроматографски ефект и получаване на медни йони в различно окислително състояние.

➤ Съвместно с колеги от ИОХЦФ е установена висока активност и селективност по отношение на CO при разлагане на метанол върху медно-никелови и цинк-никелови ферити, нанесени на активен въглен от отпадна биомаса. Намерено е, че по-високата мезопористост на въглеродната матрица води до образуване на фино дисперсни и лесно редуцируеми шпинелни феритни частици, което подобрява каталитичната активност при относително ниски температури. Това, обаче предизвиква по-бързо дезактивиране поради промени в активната фаза и въглеродния носител в редукционната реакционна среда. Установено е, че тези особености могат да бъдат контролирани посредством избор на подходяща отпадна биомаса.

➤ Получени са данни за каталитичните свойства и възможностите за приложение на модифицирани с мед и платина зеолити като катализатори за пълно окисление на пропан и въглероден оксид в отпадни газове. Изследванията са разширени с експерименти върху силикатни мезопорести катализатори, модифицирани с TiO_2 при реакции на пълно окисление на пропан, хексан и въглероден оксид. На основата на модификация на йерархичен макро-мезопорест силициев диоксид (MMS) с оксиди на Co и Mn са синтезирани нови активни кобалтови, манганови и двукомпонентни Co-Mn катализатори, като са определени реакционните условия за постигане на ефективно обезвреждане на газове, съдържащи хексан.

➤ Изследван е $\text{GUA}(\text{PbI}_3)_3$ – перспективен материал за ново поколение фотоволтаици. Структурата му при стайна температура е орторомбична и показва фазов преход при 160°C . Структурата на високотемпературната фаза е хексагонална. Тя е първият представител на 4H-политипа при перовските съдържащи гуанидинов катион. Установено е, че фазовият преход не се дължи на разориентиране на гуанидиновия катион, а по-скоро на изместване и пренареждане на йодната подрешетка. По този начин, вместо двойни вериги на споделящи ръбове PbI_6 октаедри в структурата при стайна температура, във високотемпературната фаза се наблюдават полиони от Pb_2I_9 , свързани чрез върховете си. Термичните анализи в инертна атмосфера, подкрепени от мас-спектрометрия на продуктите от разграждането, разкриват три области на разлагане на $\text{GUA}(\text{PbI}_3)_3$, свързани с отделянето на CH_3I , NH_3 и N_2 и PbI_2 като краен твърд остатък.

➤ Синтезиран е нов катализатор - шпинелен никел-цинков ферит нанесен върху редуциран графенов оксид, за производство на водород от метанол. Катализаторът е силно активен и достига 100% конверсия на метанол при 650 K. Наблюдава се почти пълна и стабилна селективност към CO и H_2 в продължение на 3 часа. Композитът притежава значителен потенциал за опазване на околната среда като евтин и ефективен катализатор за производство на водород.

➤ Изследвани са получени образци с номинален състав $\text{Cu}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$, синтезирани чрез зол-гел техника на горене от разтвор, като се използват съответните метални нитрати и лимонена киселина като комплексообразуващо средство и горивен

агент. Каталитичната активност на пробите в реакция на окисление на етилацетат силно зависи от вариациите в структурните и текстурни характеристики на пробите. Пробата, синтезирана при най-високо съотношение на лимонена киселина към металните йони, се характеризира с най-малкия размер на феритните кристали, по-висока специфична повърхност и най-добра каталитична активност.

➤ С помощта на *in situ* ИЧ спектроскопия и термопрограмирана десорбция на азотни оксиди е установено, че адсорбцията на водород (деутерий) при стайна температура върху денокс катализатора Pt/CeO_x/ZrO_x/γ-Al₂O₃ води до редукция на Ce⁴⁺ до Ce³⁺, формиране на значителен брой кислородни ваканции и адсорбирани, водородно свързани водни молекули. Получените по този начин сравнително високо термично стабилни водородно свързани хидроксилни групи повишават адсорбцията на азотни оксиди и играят важна роля в NO_x адсорбционния механизъм при ниски температури.

Оксидни тънки слоеве и нанопрахове за фотокаталитични приложения

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Високотемпературни оксидни системи“, „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“, „Материали и процеси за опазване на околната среда“

➤ Получени са прозрачни хомогенни гели в система TiO₂-TeO₂-ZnO при комбинирането на органични и неорганични прекурсори. В зависимост от съдържанието на TiO₂ гелирането се извършва за различно време и като резултат са оформени няколко области на гелообразуване. При нагряване на гелите се получават композитни прахове, които съдържат аморфна фаза и различни кристални фази: TiO₂ (анатаз), TiO₂ (рутил), α-TeO₂ и ZnTeO₃. Основните структурни групи изграждащи аморфните фази са TiO₆, ZnO₄ и TeO₄. Данните от УВ-Вис спектроскопията показваха, че абсорбционният ръб на гелите варира от 330 до 364 nm, а повишаването на съдържанието на TiO₂ предизвиква отместване („red shifting“) на абсорбционния ръб към по-високите стойности на дължината на вълната. Изчислените стойности за ширината на забранената зона (3.41 – 3.75 eV) са по-високи от тези на чистите оксиди.

➤ Чрез механохимично активиран твърдофазен синтез са получени монофазни образци от CuMoO₄ и CoMoO₄. Като резултат е понижена температурата на твърдофазен синтез на CuMoO₄ с 150 °С, а на CoMoO₄ с 250 °С. Размерът на кристалите на образците е 40 и 33nm и ширината на забранената зона е 2.2eV и 3.5eV, съответно. Луминесцентни спектри показваха интензивна синя емисия и за двете фази.

➤ Изследвани са фотокаталитичните свойства на нанопрахове от TiO₂, синтезирани по хидротермален метод, последван от калциниране при 450°C и дотирани с фосфор с различно съдържание (1,25; 5; 7,5 и 10 mol %). Филмите се използват като фотокатализатори за разлагане на багрилото Reactive Black 5 във воден разтвор при облъчване с UV светлина. Наличието на оптимална концентрация на допанта и размер на частиците във нанопраховете, определя повишаването на тяхната фотокаталитична ефективност към разграждане на Reactive Black 5.

➤ Нови фотокаталитично активни полидифенилацетилен-ZnO и полидифенилацетилен-ZnO-полистирол нанокмозити са получени чрез смесване на разтвор на полидифенилацетилен в различни разтворители (ацетонитрил или толуен) с

хидротермално синтезиран наноразмерен ZnO. Наноконкомпозитът полидифенилацетилен-ZnO-полистирол демонстрира по-висока фотокаталитична способност за разграждането на MG (88%), отколкото тази на полидифенилацетилен-ZnO (64%). Комбинацията от конюгиран полимер (полидифенилацетилен), полупроводников оксид (ZnO) и полистиролова матрица и възможно синергично взаимодействие между ароматните полимерни партньори и повърхността на ZnO е причина за повишената фотокаталитична ефективност.

➤ Получени са многослойни структури върху нисковъглеродна стомана, състоящи се от подслоя на TiO₂ и нанесен върху него слой от ZrO₂. В корозионна среда от NaCl е установено влиянието на използвания полимер – хидрокси пропил целулоза върху морфологията на подслоя, а от там и на потенциодинамичните характеристики на крайната структура.

➤ Синтезирани са наночастици от ZnO чрез комбинация от зелен синтез (екстракт от *Mentha Arvensis*) и хидротермална обработка. Установено е, че в сравнение с чистия ZnO, образците получени чрез зелен синтез притежават развита специфична повърхност, нараства относителния дял на мезопорите и имат по-висока степен на кристалност. Това са благоприятни предпоставки за приложението им като фотокатализатори.

➤ Чрез зол-хидротермален синтез е получен нов хибриден материал на основата на Р-дотиран TiO₂, съдържащ Магнели фаза от по-висок хомоложен ред (Ti₁₅O₂₉), брукит и анатаз. Установена е неговата висока ефективност под действие на видима светлина по отношение пълното фотокаталитично окисление на етилен във въздушна среда, както и разграждането на ацетилсалицилова киселина във водна среда.

Сорбенти за пречистване на течности

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Електронна спектроскопия на твърди повърхности”, “Материали и процеси за опазване на околната среда”, „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“

➤ С рентгенова фотоелектронна спектроскопия са изследвани повърхностните химични изменения върху медни електроди покрити с оксидни слоеве съдържащи Cu²⁺ и Cu⁺ йони след бактериална електрохимична интервенция върху тях. Целта на измерването е да се установи степента на възстановяване на металната мед. Резултатите показаха, че методът на бактериалната електрохимична интервенция е приложим за почистване на водата от мед без допълнително влагане на енергия. Изследванията са в рамките на научно сътрудничество с проф. д-р Марио Митов от Югозападния Университет в Благоевград.

➤ Анализирани са многокомпонентни наноструктури, съдържащи Fe, Ni, Co, отложени върху силно порьозен никел. Химическият състав е изследван с рентгенова фотоелектронна спектроскопия, като са определени валентните състояния на Fe, Ni и Co при използвания иновативен метод за нанасяне. Получените материали биха могли да се използват като катода в клетки за бактериална електролиза. Изследванията са в рамките на научно сътрудничество с проф. д-р Марио Митов от Югозападния Университет в Благоевград.

➤ Изследвана е ефективността на два биосорбента на основата на *Hypericum perforatum* L. (жълт кантарион) и *Achillea millefolium* L. (бял равнец) за отстраняване на медни(II) йони от водни разтвори. Наличието на хидроксилни, карбоксилни, amino- и други функционални групи доказва способността им за свързване на метални йони чрез йонообмен или комплексообразуване. Определени са основните параметри, влияещи върху адсорбционния процес: количеството сорбент, киселинността на средата, времето на контакт, изходната концентрация на медните йони и температурата. Двата изследвани материала имат висок адсорбционен капацитет по отношение на медни йони и могат да намерят приложение като ефективни и евтини биосорбенти за пречистване на замърсени с тежки метали води. Изследвани са и условията за регенериране на биосорбентите.

➤ Активни въглени, получени от отпадни селскостопански продукти бяха модифицирани чрез стандартна импрегнационна процедура, като са използвани самостоятелно или в комбинация с Cu(II) , Zn(II) и Ag(I) соли. Проведен е адсорбционно-текстурен анализ на получените материали и са определени основните им параметри. Модифицираните активни въглени ще бъдат изследвани за адсорбция на цианидни йони от водни разтвори.

➤ Съвместно с ФХФ на СУ е проведено моделиране чрез пълен факторен експеримент за адсорбцията на медни(II) йони от отпадния продукт след извличане на етеричните масла от маточина (*Melissa officinalis* L.). Изследван е ефектът на изходната концентрация на медни йони; рН на изходния разтвор и количеството адсорбент върху адсорбираното количество медни йони.

➤ Изследвана е адсорбцията на наночастици от манганов ферит за очистиране на водни разтвори от Cr(VI) йони. Показано е, че уравнението на Лангмюир и кинетичният модел на реакция от псевдо-втори порядък описват най-добре равновесните експериментални данни. Настоящото проучване показва, че синтезираните наночастици от манганов ферит са подходящи за отстраняване на Cr(VI) от водни разтвори главно при ниски концентрации.

➤ Анализирани са механизмите на реакциите, протичащи на анода при електрохимично активираната вода с цел да се изясни най-същественният компонент, който определя високата окислителна активност на анолита. Предположено е, че водородният пероксид, който се образува при взаимодействието на два хидроксилни радикали, е вероятно основният активен компонент на анолита, който определя неговите бактерицидни и дезинфекциращи средства.

Инфрачервена спектроскопия на повърхностни съединения и механизми на каталитични реакции;

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията "Реактивност на твърди повърхности"

➤ Публикувана е образователна статия във видео формат с отворен достъп в американското Списание за визуализирани експерименти (JoVE), описваща подробно методологията на *in situ* ИЧ спектроскопията, прилагана от изследователския екип на Лаборатория РТП при изследване на прахообразни поликристални материали, включително всички етапи на експеримента, от пробоподготовката до характеризирането с молекули-сонди и изследването на взаимодействието с различни, представляващи интерес адсорбати. Накрая са илюстрирани възможностите на метода като е показано как с *situ* ИЧ спектроскопия се наблюдава необичайно повишаване на

адсорбционния капацитет на пореста металорганична структура спрямо CO_2 при добавяне на водни пари и се изяснява механизма на това явление.

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

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“, „Кристалохимия на композитни материали“, "Реактивност на твърди повърхности"

➤ Изследвано е сензорното поведение на различни наноструктури и нанокompозити на основата на ZnO (Pd-ZnO, Ag-ZnO и PdAg-ZnO), получени чрез лазерна аблация във въздуха при атмосферно налягане. Системата PdAg-ZnO показва значително подобрен отклик към пари на ацетон при едновременно облъчване с UV и червена светлина. Установена е реакция към пари на ацетон с концентрация под 1 ppm, което може да се разглежда като първа стъпка към лесно и евтино производство на ацетонов сензор, подходящ за диагностика на диабета.

➤ Изследвано е сензорното поведение на нанокompозити на основата на ZnO и TiO_2 (5wt% TiO_2 в ZnO и 10wt% TiO_2 в ZnO) при стайна температура при въздействието на различни газове (CO и пари на амоняк, ацетон и етанол). Наблюдава се нарастване на отклика на всички тествани газови компоненти с увеличаване на съдържанието на Zn_2TiO_4 фаза, като той е най-съществен за парите на NH_3 и CO (повече от 8 пъти).

➤ С рентгенова фотоелектронна спектроскопия са изследвани композитни наноматериали, състоящи се от подредени наночастици, получени чрез усъвършенствана технология за импулсно лазерно отлагане, включваща магнитно поле. Изследвани са различни серии от образци на основата на Fe, дотирани с Ag, ZnO и TiO_2 . Определена е концентрацията и валентното състояние на елементите (Fe, Ag, Zn, Ti, O, C) на повърхността на серията синтезираните образци.

➤ Сравнени са микроструктурните свойства на дебели филми от Y-тип ($\text{Ba}_2\text{Mg}_2\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$, $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{Zn}_2\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$, $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{Zn}_2\text{Al}_{0.08}\text{Fe}_{11.92}\text{O}_{22}$) и Z-тип ($\text{Sr}_3\text{Co}_2\text{Fe}_{24}$) хексаферити върху полиакрилна подложка. Установено е, че микроструктурата на филмите се различава от тази на съответните обемни материали. В процеса на термично третиране филмите нарастват под формата на хексагонални частици, като последните имат най-голям размер, най-добра форма и се наблюдават най-добре в случая на филма от $\text{Ba}_2\text{Mg}_2\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$.

➤ Изучено е влиянието на заместването на магнитния катион (Ni^{2+}) с немагнитен (Zn^{2+}) върху структурните и магнитните свойства на поликристални $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{Zn}_{2-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$ ($x = 0.8, 1, 1.5$) получени по метода на горене от разтвор. Преход на магнитното подреждане от хеликоидално към феримагнитно за пробата с $x = 1.5$ се наблюдава при 284 K, а от конично към хеликоидално при 149 K и 177 K за пробите с $x = 0.8$ и $x = 1$, съответно. При всички проби при 4.2 K се наблюдават тройни цикли на хистерезис, което показва наличие на два вида феромагнитни състояния с различни стойности на намагнитване.

➤ Съвместно с Хановерския Университет Лайбниц, бяха изследвани две нанокристални металорганични структури на базата на циркониев терефталат, $\text{UiO}-66$ и $\text{UiO}-66-\text{NH}_2$, синтезирани солвотермично, по отношение на тяхната приложимост в сензорни устройства за CO_2 . Бе установено с *in situ* ИЧ спектроскопия, че както функционализацията с amino групи, така и коадсорбцията с вода промотират афинитета и адсорбционния капацитет по отношение на CO_2 . Диелектричните измервания показаха, че $\text{UiO}-66-\text{NH}_2$ е по подходящ за сензори в целия

концентрационен диапазон, тъй като в сравнение с U₁₀-66 е по-чувствителен при ниски концентрации и продължава да променя електрическия си капацитет при концентрации близки до 100%.

Тема В: Оползотворяване на природни ресурси и екологичен мониторинг

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

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Солеви системи и природни ресурси“ и „Методична лаборатория по атомна спектроскопия“

➤ Изследвана е динамиката на химичните форми на преходните метали Mn, Ni, Cu, Zn, Cd и Pb в системата *почва – почвен разтвор – растителност* в три района: (а) на гр. Казанлък с развита машиностроителна и военна индустрия, включително военно-изпитателен и военно-обезопасителен полигон Змеево; (б) Църквище – Пирдоп – Челопеч с развита медно-добивна и преработваща промишленост; и (в) Куклен - Лъки - Рудозем с развита оловно-цинкова минна промишленост.

Почвите са оценени въз основа на тоталното съдържание на изследваните преходни метали (екстракция с царска вода), както и на съдържанието на обменни (екстракция с 1М KCl) и водоразтворими (екстракция с дестилирана вода) йони. Изчислени са индивидуалните и средни индекси на замърсяване, геоаккумуляционния индекс (I_{geo}) и индексите на мобилност на изследваните преходни метали.

Резултати

Район Казанлък - Стойностите на Mn, Ni, Cu, Zn и Pb, които се нормират от Българското законодателство, са под ПДК. Установено е, че тоталното съдържание на Cd е под границата на откриване на метода във всички почвени проби. Според изчислените геоаккумуляционни индекси на преходните метали, изследваните почви са в категорията „незамърсени почви“. Само по отношение на Zn и Pb някои от почвите са в категория „незамърсени или умерено замърсени почви“ и в категория „умерено замърсени почви“. Индексите на мобилност показват, че във всички случаи се наблюдава тенденция към по-висока обменна мобилност на Mn, Ni, Zn и Pb в сравнение с водоразтворимата, като в най-голяма степен се екстрахира Mn, последван от Zn и Pb. Това определя по-големия дял на електростатично абсорбираните в почвите обменни преходни метали в сравнение с водоразтворимите. При Cu, тенденцията е обратна, което говори за различен характер на замърсяванията.

Район Църквище – Пирдоп – Челопеч - За разлика от почвите в район Казанлък, тези показват сериозно замърсяване с Cu, чиято концентрация е от 1.77 до 2.9 пъти над ПДК за постоянни тревни площи (pH_{H2O} > 7.4) спрямо Българско законодателство, Наредба 3/2008. По-високи са и измерените концентрации на Mn и Zn. Изчислените геоаккумуляционни индекси показват, че по отношение на Cu и Pb почвите са в категория „умерено до силно замърсени“, а по отношение на Zn - „незамърсени до умерено замърсени“. По отношение на мобилността на преходните метали се запазва тенденцията за по-висока обменна мобилност в сравнение с водоразтворимата.

Район Куклен - Лъки – Рудозем – Почвите в този район са най-замърсени от всички изследвани почви, като най-високи са концентрациите на Zn, Cd и Pb в почвите в района на КЦМ Пловдив (с. Куклен), превишаващи ПДК 2-3 пъти. Изчислените геоаккумуляционни индекси показват, че по отношение на Zn почвите са „умерено до силно замърсени“, докато по отношение на Cd и Pb са в категорията „от силно до

екстремно замърсени“. Запазва се тенденцията за по-висока обменна мобилност в сравнение с водоразтворимата, като най-мобилни са Cd^{2+} , последвани на порядък пониско от Co^{2+} , Mn^{2+} и Zn^{2+} йони.

Акумулацията на Mn, Ni, Cu, Zn и Pb в *Gramineae* (обикновена трева) е определена на база изчислен акумулационен фактор (*Fa*) (отношение от съдържанието на преходните метали в растенията и съответните почви). И в трите района, най-високи стойности за *Fa* са получени за Cu, по-ниски са тези на Zn и най-ниски за Mn.

Изчислени са химичните форми на съществуване на изследваните преходни метали във водните почвени екстракти. Резултатите показват, че Cu и Zn, които се натрупват в най-голяма степен в изследваната растителност, съществуват главно под формата на OrgCuOH-(бидентатни връзки), OrgCu(бидентатни връзки) и OrgZn(бидентатни връзки). Mn се натрупва сравнително слабо в изследваната растителност, т.е. притежава по-ниска акумулираща способност. За него са изчислени доминиране на свободните Mn^{2+} йони, заедно с неорганични карбонатни и монодентатни органични комплекси.

Изследванията показаха, че биоакумулирането на преходни метали зависи от тяхната подвижност, концентрация и химични форми във водни почвени разтвори. Металоорганичните форми с фулвокиселини стимулират фитоакумулацията, докато неорганичните форми я потискат.

➤ Изследвани са химични и физикохимични параметри на маслинов шрот, отпадък от производството на зехтин, с цел използването му като добавка към материали за компост. Резултатите показват, че изследваният маслинов шрот се характеризира с високо съдържание на влага, летливи съединения (71,8%) и сурово масло (24,1%). Последното може да причини неблагоприятен ефект върху биохимичните и микробиологичните свойства на почвата в процеса на третиране. Маслиновият шрот има високо съдържание на C (22,32%) и K (2,24%), което би могло да бъде изгодно за процес на компостиране, но само в случай на въвеждане на вещества, съдържащи допълнителни количества азот.

Получаване, съхранение и оползотворяване на български природни ресурси

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“

➤ Продължава разработването на технологии за нови продукти с участие на черноморска луга и кал.

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

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Методична лаборатория по атомна спектроскопия“

➤ Съвместно с колеги от Германия (TU Bergakademie Freiberg, Freiberg, Germany) е изследван елементният състав на материали на основата на етерично-маслените растения лавандула (*Lavandula angustifolia L.*) и маточина (*Melissa officinalis L.*), както и на отпадните продукти след извличане на етеричните масла от тях с помощта на метода Електротермично изпарение, съчетано с атомноемисионна спектроскопия с индуктивно свързана плазма. Определени са едновременно концентрациите на 28 макро-, микро- и следови елементи (есенциални, неесенциални и токсични елементи) в изследваните растителни материали, без наличие на матрично пречене. Изчислени са

аналитичните характеристики на методиката - стандартните отклонения (SD), относителните стандартни отклонения (RSD), границите на откриване (LOD) и границите на количествено определяне (LOQ).

➤ Разработена е процедура за разлагането на етанолно-гликолни билкови тинктури на фирма „Билкова аптека“ с цел определянето на елементния им състав с ICP-OES метод. Антиоксидантната активност на билките се определя до голяма степен от съдържащите се в тях флавоноиди, чието общо съдържание може да бъде определено с бързи и евтини спектрофотометрични методи. Направена е литературна справка по темата и са проведени експерименти за определянето им в изследваните билкови екстракти съгласно няколко адаптирани процедури, при които като стандарт е използван флавоноида кверцетин.

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;

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Интерметалиди и интеркалационни материали“, „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“ и „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“

➤ Съвместно с македонски учени са проведени ИЧ и Раман спектроскопски изследвания върху малко изучени струвитен тип соли хексахидрати на основата на рубидий и талий, характеризиращи се със здрави водородни връзки, които представляват интерес от гледна точка на протонна проводимост при ниски температури.

➤ Двойните сулфатни соли кристалохидрати на натрия и преходните метали със структури тип бльодит и кръонкир са термодинамично охарактеризирани. Използвайки комбинация от калориметрични методи са определени енталпията на образуване и ентропията на тези фази, пресметнати са енергията на Гибс и е оценена тяхната стабилност. Показано е, че натриево никелово сулфатната фаза е най-стабилна, докато Na-Mn, Na-Co, и Na-Cu фази се характеризират с по-ниска стабилност. Изследването е проведено заедно с учени от Германия и Австрия.

➤ Проведено е системно ЕПР изследване на дендримери и въз основа на него са определени типа на координиране на медните йони и влиянието на катийонната координация върху биоактивните свойства на дендримерите. Изследванията се провеждат в тясно сътрудничество с учени от ФХФ-СУ.

➤ Заедно с учени от ХТМУ-София бяха изучени формите на включване на железни йони в дотирани барието-титанови стъкло-керамики. На базата на ЕПР метода бе показано, че съществуват четири типа различно координирани Fe^{3+} йони, като съотношението между тях зависи от температурата и времето на отгряване.

➤ Чрез ЕПР спектроскопия бе проследен процеса на включване и разпределение на медни йони в електроовлакнени полимерни материали, проявяващи антиоксидантна и антитуморна активност. Изследването е проведено съвместно с учени от ИП-БАН.

➤ Съвместно с учени от ИЕ-БАН и ФзФ-СУ са проведени изследвания върху графен и графенов оксид, получени чрез модификация на аморфни и нано-дисперсни въглеродни фази. Проведени са РФС изследвания на модифицирани суспензии от

микрочестотен графит във вода с лазер, варирайки различните дължини на вълната, плътностите на енергията на излъчването и концентрации на суспензиите. РФС резултатите заедно с получените резултати от Раманова спектроскопия и грейзинг- РФ анализ свидетелстват за образуване на дефектен графен, rGO, GO и аморфизирани въглеродни частици. На базата на извършени многократни синтези и охарактеризиране е установено, че резултатите за модификацията на микрочестотен графит със Nd:YAG лазер във вода са възпроизводими.

Модифициране на графеноподобни слоеве чрез облъчване с UVC светлина. Наноразмерни, предимно двуслойни графеноподобни филми, получени чрез лазерна аблация, са модифицирани чрез UVC светлина във въздушна среда, ориентирана почти паралелно на слоя. Според XPS резултатите, облъчването причинява увеличаване на C-O / C-OH връзките, на които се приписва sp³ хибридизиран въглерод и намаляват или напълно изчезват въглеродните връзки тип -C=O/-COOH, свързани с sp² хибридизирания въглерод. Общото съдържание на въглерод намалява и след UVC облъчване. Измерванията на Раманова спектроскопия показват умерено подобряване на структурното качество на филмите след 15-минутна UVC обработка.

➤ Съвместно с учени от ФХФ-СУ е проведено моделиране чрез пълен факторен експеримент 2³ за адсорбцията на медни(II) йони от отпадния продукт след извличане на етеричните масла от маточина (*Melissa officinalis L.*). Избрани са входящи фактори: рН на изходния разтвор; изходната концентрация на медни(II) йони и количеството адсорбент; изходящите функции са съответно адсорбираното количество медни (II) йони и % адсорбция. Установено е, че трите входящи фактора са статистически значими по отношение на изходящите функции. За линейния модел, корелационният коефициент r^2 за съответствието «изчислени/експериментално намерени» стойности е получен по метода на най-малките квадрати. Регресионният модел е проверен за адекватност и показва висока корелация с $r^2 = 0.923$.

➤ Клъстерен анализ и анализ на главни компоненти е приложен към резултатите за елементния състав на археологични стъкла. Наборът от данни обхваща 25 обекта - фрагменти от 19 български стъклени гривни, анализирани от колектива, и 9 артефакта, описани в литературни източници. Провеждането на клъстерен анализ на обектите показва формиране на 3 групи (клъстери) - K1, K2 и K3. Анализът на главни компоненти потвърждава резултатите от клъстерния анализ. Групирането на химическите характеристики на изследваните артефакти е тясно свързано с елементния състав на използваните суровини – K1 се свързва със състава на кварцовия пясък; K2 – с термичните характеристики на стъклата (висока термоустойчивост), и K3 – с топилите и други стъклоформиращи параметри.

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

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Теоретична и изчислителна химия“

➤ Разработена и валидирана е изчислителна методология за пълно описание на фотофизичния процес на луминесцентни лантанидни комплекси, комбинираща квантовохимични изчисления и полуемпирични изчисления, базирани на теория на Judd-Ofelt за 4f-4f прехода и теорията на Малта за енергиен трансфер. В резултат на теоретичното изследване са определени енергетичните диаграми на серия Eu(III) и Tb(III) комплекси с кумарин-3-карбоксилната киселина, възможните скорости на енергиен пренос от лиганда към лантанидния йон, и е предсказан механизма на

енергиен пренос и квантовия добив за два европиеви комплекса в различно обкръжение. Изчислените квантови добиви са в съгласие с експериментално установените. Резултатите от изчисленията помогнаха да се разкрият детайлно факторите отговорни за наблюдаваните различни квантови добиви, както и да се очертаят условията за постигане на по-висок луминесцентен квантов добив.

➤ Теоретично е изследван сорбционният механизъм (физисорбция и хемисорбция) на МСРА хербицид с доминираща повърхност на минерала goethite (110) в няколко рН области (3–4, 4–9, 9) с прилагане на спин-поляризиран DFT формализъм за периодични гранични условия. В съгласие с експерименталните данни, изчисленията показват, че адсорбцията на МСРА нараства с намаляване на рН. Установено е, че това се дължи на присъствието на неутралната МСРА молекула ($pK_a \sim 3$) при ниско рН и нейната по-слаба солватиреща енергия, която води до по-стабилни комплекси в разтвор в сравнение с анионна форма при рН 4–9. Показано е, хемисорбционният механизъм е основния адсорбционен механизъм в кисела среда. В хемисорбционният комплекс се реализира монодентатно свързване чрез образуване на мостова група Fe–O–C.

➤ Изследвана е локализацията на клъстери на преходни метали (5-10 атомни) в алуминосиликатни и алуминофосфатни микропорести материали – оптимална координация, разпределение на електронната плътност, активност в реакции с участие на алкални реагенти и възможност за делокализация на зарядите. Изчисленията са проведени с метода на функционала на електронната плътност и метода на свързаните клъстери (CCSD), в случаите, за които вторият метод е приложим. Резултатите показват, че за каталитични процеси основна роля имат малки по размер метал-халкогенидни клъстери, (до 5 метални атома) и в зависимост от размера на порите те се подреждат линейно или пирамидално, като за стабилизиране на пирамидалната структура е необходима координация с електрон-донорни лиганди – карбонилни или халогенидни, като хлоридните йони са най-подходящи за стабилизирането на клъстери на 3d елементите.

➤ На базата на *ab initio* квантово-химични изчисления е разработена и предложена мрежа от самокатализиращи химични реакции, показваща как само при нагряване на формамид могат да се получат карбамид, изоцианова киселина и основните пуринови бази (аденин, хипоксантин, гуанин, изогуанин, ксантин).

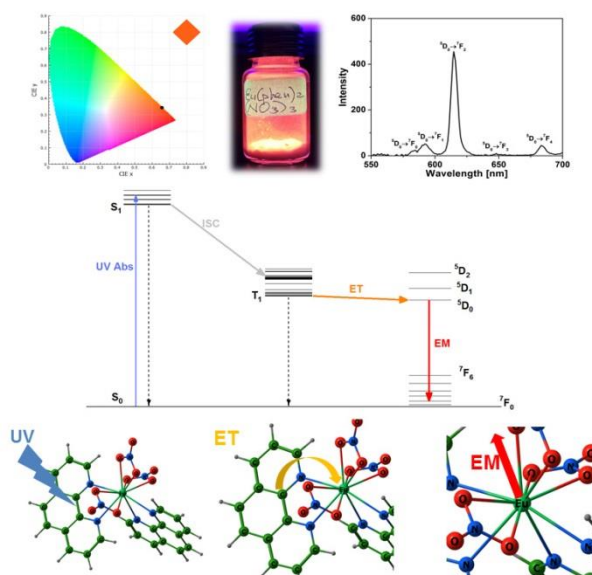
➤ Предложен е пълен реакционен път и механизми на пребиотични реакции за образуване на хипоксантин от карбамид, мравчена киселина и глицинамид. Подробно е разгледана ролята на мравчената киселина, диформилуреята и формамида, като катализатори, пренасящи протон.

➤ Посредством флуоресцентни и изчислителни методи е изследвано свързването на тавтомерите на 2-карбамидо-1,3-индандион (CAID) към нуклеотиди. Установено е, че съединението се свързва с нуклеинови киселини чрез водородни връзки към фосфатната група, а не се интеркалира. Поради липсата на цитотоксичен ефект върху нетрансформирани клетъчни линии на фибробласти на миши ембрион Balb/c 3T3 и афинитета към нуклеиновите киселини, се предполага, че CAID може да бъде подходящ за използване като нов тип флуоресцентен биомаркер.

2.1. Най-значимо научно постижение в ИОНХ

Теоретичен подход за дизайн на луминесцентни материали, базирани на лантанидни комплекси с лиганди хромофори

Разработването на нови луминесцентни материали за високотехнологични оптични приложения (лазери, сензори, светодиоди и фотоволтаици) изисква информация за механизма на енергийното превръщане в структурата на материала. Тази цел може да се постигне посредством теоретично моделиране в тясна връзка с експериментални измервания. Същността на научното постижение се състои в разработване и валидиране на изчислителна методология за моделиране на оптичните свойства на луминесцентни лантанидни комплекси с лиганди хромофори. Проведените изследвания ни позволиха да получим информация за стабилността на комплексите, енергията и интензивността на абсорбция и емисия, скорост на излъчвателни и безизлъчвателни преходи в зависимост от средата и типа комплекси. Бяха установени специфичните фактори, отговорни за интензивна луминесценция и високи квантови добиви в комплекси на Eu(III) и Tb(III). Този подход позволява системен *in silico* дизайн на нови високоефективни антена хромофори, стимулиращи луминесцентното излъчване на лантанидните йони. Очаква се разработената стратегия да намери широко приложение за подобряване на фотофизичните свойства на оптичните материали на основата на рядкоземни съединения.



Механизъм на енергийната конверсия и луминесцентна емисия, изведени въз основа на квантовохимични изчисления на Eu(III) комплекс с лиганд-хромофор (phen) при облъчване с UV-светлина.

Научен колектив: доц. д-р Ивелина Георгиева, гл.ас. д-р Цветан Захариев и проф. д-р Наташа Трендафилова
Лаборатория "Теоретична и изчислителна химия" - ИОНХ-БАН

Научни публикации:

Georgieva I., Zahariev Ts., Aquino AJA, Trendafilova N., Lishka, H.(2020) *Spectrochimica Acta Part A*, 240, 118591, **IF 3.232, Q1**.

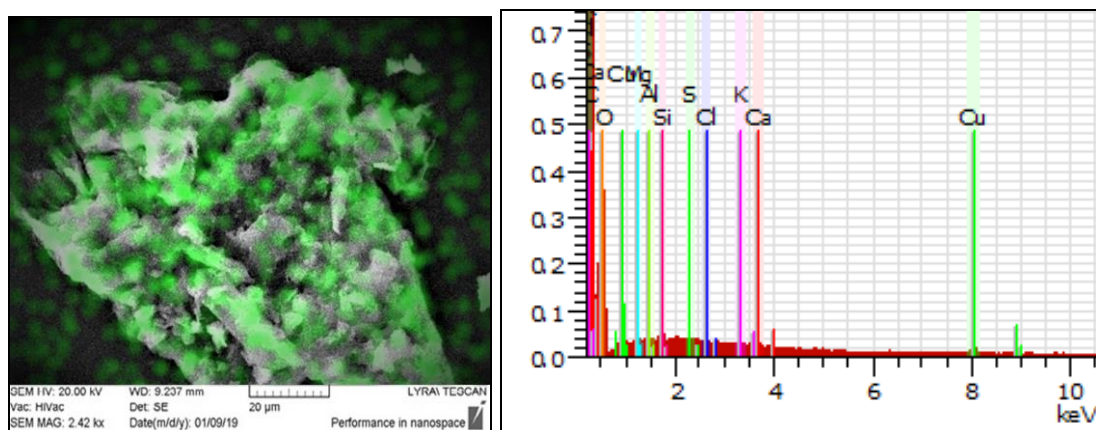
Zahariev Ts., Shandurkov, D., Gutzov S., Trendafilova N., Enseling D., Justel T., Georgieva I (2021) *Dyes and Pigments*, 185, 108890. **IF:4.613, Q1**

Проект ФНИ: „Молекулно моделиране и експериментално охарактеризиране на лантанидни системи и хромофори с оптични свойства“ 2016-2020.

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение в ИОНХ

Биосорбент за пречистване на водни разтвори от медни (II) йони на основата на жълт кантарион (*Hypericum perforatum L.*)

Изследването използва биосорбцията като метод за отстраняване на токсични метали от водни разтвори. Растителен материал на основата на жълт кантарион (*Hypericum perforatum L.*), получен след сушене до 60°C и смилане, показва добри адсорбционни свойства по отношение на медни (II) йони. Това се дължи както на развитата пореста структура на материала, така и на различните функционални групи, които участват в свързването на металните йони чрез комплексообразуване или йонообмен. Намерени са оптималните параметри, които влияят на отстраняването на медни (II) йони – началната им концентрация, киселинността на средата, времето на контакт, температурата. Изследваният биоматериал има висок адсорбционен капацитет по отношение на медни(II) йони и може да намери приложение като ефективен и евтин биосорбент за пречистване на замърсени с тежки метали води.



Картографиране и елементен анализ на повърхността на изследвания материал след адсорбцията на Cu^{2+} .

Ръководители: доц. д-р Паунка Василева и доц. д-р Албена Дечева

Научна публикация:

Lidia Ivanova, Paunka Vassileva, Albena Detcheva, “Characterization and adsorption properties of *Hypericum perforatum L.* for the removal of Cu^{2+} ions from aqueous solutions”(2020) *Cellulose Chemistry and Technology*, 54(9-10) 1033-1040. **IF=0.857, Q3**

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ИОНХ

В рамките на проекта “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam), през 2020 г. ИОНХ установи сътрудничество с три водещи научни организации: Имперски колеж в Лондон (Великобритания), Институт за приложни материали – системи за съхранение на енергия към Технологичния институт в Карлсруе (Германия) и Институт по материалознание при Университета на Севиля (Испания). Това сътрудничество има потенциал да се развие и утвърди при изпълнението на проекта през следващите две години.

Международното сътрудничество 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 2020 г. ИОНХ е водеща организация на два проекта по двустранна спогодба на ФНИ с Русия (Санкт-Петербургский Государственный Университет) и с КНР (Университета по технологии, Департамент по инженерна механика в гр. Далян).

Учени от ИОНХ продължават изпълнението на дългогодишни междуакадемични договори и споразумения по 3 теми с Университет "Св.св. Кирил и Методий" – Скопие, Северна Македония (Структурно характеризирани и изследвани на електричните и каталитични свойства на новосинтезирани неорганични и органично-неорганични комплексни перовскити, с Университет "Бар Илан", Рамат Ган, Израел (Катодни материали с високо съдържание на никел $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_2$ ($x \geq 85$ at.%) за усъвършенствани литиево-йонни батерии: синтез на недотирани и катионно-легирани материали, структурни, повърхностни и електрохимични изследвания) и Институт по химия, технология и металургия, Център по Катализ и химично инженерство Сръбската академия на науките и изкуствата, Сърбия (Моно- и поли-компонентни каталитични системи за пречистване на води и въздух онечистени с моделни замърсители).

Двама учени от ИОНХ имат лични участия в проект на Руския фонд за научни изследвания и на ФНИ по двустранно сътрудничество с 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: Изследователския център по неутрони към Техническият Университет (Мюнхен, Германия), Университет в град Кордоба (Кордоба, Испания), Bilkent University, Анкара, Keio University, Йокохама, Texas Tech University, Lubbock, University of Natural Resources and Life Sciences, Виена, Nagaoka University of Technology, Nagaoka, National and Kapodistrian University of Athens, St. Petersburg State University, с Университета в Атина, с Университета в Прага и с Чешката академия на науките и др. В резултат на международно сътрудничество, което ИОНХ поддържа, 35 % от научните публикации е с чуждестранни учени от водещи научни организации.

4. УЧАСТИЕ НА ИОНХ В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ

ИОНХ активно изпълнява **образователната програма с качествено и конкурентоспособно обучение на докторанти** в различни форми и образователни инициативи. 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. След подадени доклади-самооценки се очакват резултатите от НАОА по акредитацията на докторските програми за следващите 6 години. В центъра за обучение на БАН, учени от ИОНХ предлагат 7 специализирани курса. През 2020 г. са проведени три курса по „Неорганична кристалохимия и ренгеноструктурен анализ“.

През 2020 успешно са защитили дисертационния си труд **трима докторанти** на задочна (2) и редовна (1) форма на обучение по докторска програма „Неорганична химия“ (1) и химия на твърдото тяло (2). 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 2020 година, четирима докторанти (1 редовна, 1 задочна и 2 на самостоятелна подготовка) са отчислени с право на защита. Хабилитирани учени от Института са съръководители на 5 докторантури в други научни организации - ИЕЕС-БАН, ИЕ-БАН, ФХФ-СУ, ХТМУ, ПУ и един докторант на ИМСТ-БАН със съръководител от ИОНХ е защитил.

ИОНХ продължи през 2020 г. да осигурява добри условия за развитие на научния потенциал на младите учени. От девет докторанта, защитили дисертации в периода 2016-2020 г., осем от тях продължават научната си кариера в ИОНХ, усъвършенстват работата си със специализирана апаратура, участват активно в научни проекти на Института.

Четирима учени от ИОНХ успешно работят по проекти на Националната програма „Млади учени и постдокторанти“ към МОН като 3-ма са по модул Млади учени и един - по модул Постдокторанти. Активната научна работа на младите учени по проекти допринася за развитието им като специалисти и за успешното им интегриране в европейското изследователско пространство. За трета 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 са финансово и кариерно неатрактивни за младите хора.

През 2020 г. учен от ИОНХ (гл. ас. д-р Мария Ганчева) продължи работата си по 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 организира съвместно с ФХФ-СУ, **ЮБИЛЕЙНА НАУЧНА СЕСИЯ** посветена на 100 – годишнината от рождението на Академик ГЕОРГИ БЛИЗНАКОВ. Тази онлайн сесия даде форум на 92 колектива от научни организации в страната да представят с постери и разширени резюмета научните си резултати.

Учени от ИОНХ са участвали в комисии на докторантски изпит по специалността (2 учени) и в изпитни комисии по конкурс за академична длъжност „главен асистент“ (6 учени). Тази година успешно се проведе един конкурс за академичната длъжност „главен асистент“.

За поредна година е проведен четиридневен семинар (с. Чифлик) за обучение на членовете на лабораторията «Солеви системи и природни ресурси» от София и Бургас (производствена база), финансиран от Вътрешен договор партида „Ръководител договор“.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

5.1. Осъществяване на съвместна иновационна дейност с външни организации и партньори, вкл. поръчана и договорирана с фирми от страната и чужбина;

➤ Извършени са изследвания на индустриални катализатори за работа в системи за опазване на околната среда, производство на фирмата Халдор Топсо (Дания). Разработват се математични модели на кинетиката на реакцията на пълно окисление на летливи органични съединения в отпадни газове.

➤ Традиционно се разработват 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. ССПР-Бургас разработва иновативни продукти и технологии, организира малки производства на натурална медицинска 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 прогнозира 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, и през 2020 г. ССПР-Бургас разработи и внедри **9 нови козметични продукта**. Нарастват продажбите в страната и чужбина и през годината са сключени **3 нови договора с чуждестранни партньори** за продукти с марката Black Sea Stars:ФОП ПАВЕЛКО О.О. - Киев, Украйна, SIA ANIJA - Рига, Латвия, Sobrone s.r.o. - Nitra, Slovakia.

➤ През 2020 г. ИОНХ има заявено 1 изобретение „Природен композитен материал за дълбоко адсорбционно десулфуриране на течни горива“ със заявител ИОНХ. Създаден е оригинален, патентно защитен метод за състави на електроди за електроискрово и газо-пламъчно нанасяне на износоустойчиви покрития върху стоманени детайли, подложени на абразивни и механични натоварвания, на тази основа е **регистриран един нов полезен модел** „Електроден материал за електроискрово напластяване“ със съпритежател ИОНХ. Един подаден патент, с екип от 4 научни организации, вкл. ИОНХ е все още в експертиза. През 2020 г. се поддържат 4 действащи патента, 3 търговски марки и 3 полезни модела (от тях ИОНХ е притежател на два патента и един полезен модел).

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

6.1. Стопанската дейност на ИОНХ през 2020 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.

Многобройни Спа-центрове в страната ползват произвежданите от ССПР-Бургас продукти с черноморска луга. като през годината е реализирана продажба на **обща стойност 532 672.73 лв (с ДДС)**. За нуждите на ССПР-Бургас е закупено техническо оборудване на отделение „Козметика“ на стойност около 13 000 лева и са извършени строително ремонтни дейности за поддържане на сградния фонд за около 5 000 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.

По договор с международна фирма Халдор Топсо-Дания са получени **77 536 лв.**

Приходите от извършени анализи в областта на неорганичната химия - рентгенови, рентгеново-фотоелектронна спектроскопия, диференциално термични и гравиметрични анализи, ЕПР анализи, ИЧ, текстурни анализи, ТЕМ анализи и др. са **47 627 лв.** Основни клиенти са институти на БАН, НИС-СУ, ХТМУ, а от бизнес сектора - Сенсата Технолоджи ЕООД, Алианц България ЕАД, Зеолин ЕООД, Мелексис ЕООД, Октопод инвест холдинг ЕАД, МЦ Уроелит.

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 2020 г. приходите на ИОНХ се формират от:

- бюджетна субсидия	2 376 993 лв.
(за работна заплата – 1 542 163 лв., 64.9 %)	
-TwinTeam	665 807 лв.
Разлика между получени и предоставени трансфери	590 981 лв
- трансфери от БАН администрация и звена от:	
Получени	617 981 лв.
от:БАН-Администрация-	165 454 лв.
от ИФХ-БАН –	196 000 лв
от ИЕЕС-БАН	207 210 лв
от ИК-БАН-	49 316 лв.
Предоставени:	
на ИМПАМ-БАН-	27 000 лв

Собствени приходи **633 161 лв.**

- приходи от продажба на продукция (вкл.ДДС)	507 848 лв.
- приходи от извършени анализи	47 627 лв.
- договори с чуждестранни фирми (Халдор Топсо-Дания)	77 536 лв.
- приходи от дарения и др.	3 150 лв.

ИОНХ е получил през 2020 бюджетна субсидия в размер на 2 376 993 лв, като 64.9% от нея са за заплати (1 542 163 лв). ИОНХ има привлечени средства в размер на **1 889 949 лв.** или съотношението на собствените средствата към тези на бюджетната субсидия за 2020 г. е **44 %** към **56 %**. Общо бюджетната субсидия и собствени приходи формират бюджет от **4 266 942** лв.

По бюджетна субсидия средната месечна брутна работна заплата за 2020 г. е 1118 лв.) при планова за годината 1028 лв. За сравнение, тя е по-висока от миналогодишната (средна месечна 803 лв.) с **28.2%**. Благодарение на участието в мащабни проекти стана възможно през 2020 г. да бъдат изплащани и допълнителни трудови възнаграждения - общо 422 537лв., които са 21.5% от годишния Фонд работна заплата. Така, средната брутна заплата в ИОНХ през 2020 г. реално е била 1629 лв (по-висока от

миналогодишната с 50.7%). За сравнение, средната брутна работна заплата за третото тримесечие в обществен сектор за страната е 1370 лв., сектор образование - 1424 лв., за София-столица е 1855 лв. според Националния статистически институт, т.е. средствата за заплащане на труда на персонала в ИОНХ за 2020 г. са съизмерими с тези в сектор образование и с всяка изминала година доближават тези за София.

Плановата численост на ИОНХ-БАН към 31.12.2020 е 125 щатни бройки като реално заети са 118.

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/документи/> - Правилник за устройството дейността на ИОНХ (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 2020 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
МСРА	4-chloro-2-methylphenoxyacetic acid