



ОТЧЕТЕН ДОКЛАД

на ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

за **2021 г.**

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

януари 2022 г.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ИОНХ

1.1. Преглед на изпълнението на целите на ИОНХ

Дейностите и научните изследвания в ИОНХ през 2021 г. следват разработената Стратегия за развитие на ИОНХ за периода 2018-2030 г. и научно-изследователския план на Института за 2021-2024 г. С изпълнение на Стратегията, ИОНХ води устойчива научно-изследователска политика, която следва динамично променящите се икономически и социални предизвикателства, свързани с енергийната ефективност и оползотворяването на природни ресурси. През 2021 г. ИОНХ продължи да изгражда партньорска изследователска мрежа в областта на химическите науки: химия на материалите за чисти технологии в изпълнение на проекта **“Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam)**.

През 2021 г., ИОНХ продължи активно дейностите по функционирането 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, научните изследвания през 2021 г. се провеждаха по значими тематики за обществото и в изпълнение на четири 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“** и (4) **„Млади учени и постдокторанти“**.

Научните изследвания през 2021 г. се реализираха в рамките на **36 проекта** на Института и **16 проекта** с лично участие на учени от ИОНХ. В съответствие НСРНИ, Политика №4.5 **„Развитие на фундаментални научни изследвания и насърчаване на върхови научни постижения“** и Специфична цел 5 **„Устойчиво възстановяване на международните позиции на страната по количеството и качеството на международно видимата научна продукция“**, резултатите от изследванията са отразени в общо **112 научни публикации**, от които **105** са в индексирани издания в международна база данни **SCOPUS** и **Web of Science**. Научните изследвания са представени на **27 научни форума**, от тях 21 са национални и 6 - международни (предимно с виртуално участие) под формата на **111 представления**. Върху научните трудове на учени от ИОНХ през 2021 г. са забелязани около **3160 цитирания**, което е показател за високо научно ниво на публикуваните изследвания. През 2021 г. ИОНХ бе **организатор** на Трети научен семинар по размерни ефекти при материали за опазване на околната среда и получаване на чиста енергия (**SizeMat3**) в Поморие: над **80** български и чуждестранни участници, представени 8 пленарни лекции от чуждестранни учени, 10 устни доклада, 4 флаш-презентации и 61 постерни доклада. Научният форум бе в хибридна форма, включващ и виртуални презентации. Благодарение на успеха на семинара бе сключено споразумение с реферирано научно списание **“Materials Today: Proceedings”** на издателството Elsevier за публикуване на статии (около 20), включващи материали от конференцията.

ИОНХ продължи да следва политика, благоприятстваща кариерното развитие на квалифицирани учени и привличането на млади специалисти и да изпълнява водещите мерки, заложи в НСРНИ в РБ 2017-2030, в която човешките ресурси са очертани като ключов фактор за развитие на науката и иновациите в България. През 2021 г. проф. дхн Константин Хаджииванов бе избран за академик на БАН. Успешно са проведени два конкурса за главен асистент, три – за доцент и два – за професор. Двама докторанти са

защитили в ИОНХ дисертационния си труд и са придобили научната и образователна степен „доктор“. Назначени са общо 4-ма млади изследователи по проектите Вихрен и TwinTeam. През 2021 г. благодарение на високите научни постижения, двама учени от ИОНХ – академик д-р Константин Хаджииванов (Физикохимия) и проф. д-р Радостина Стоянова (Енергия), както и асоцииран учен проф. д-р Михаил Атанасов (Неорганична и ядрена химия) попадат в класацията на Станфордския университет на най-влиятелните учени в света. Двама млади учени от ИОНХ (гл. ас. д-р Мария Калапсъзова и ас. Нина Стоянова-Нанкова) са лауреати на престижната национална стипендия „За жените в науката“ 2021 по Програмата на L'Oréal и ЮНЕСКО.

През 2021 г. благодарение на активното проектно и програмно финансиране продължи подобряването на условията и качеството на научната работа с надграждане на материално-техническата база на Института: обновени са няколко лаборатории, закупени са нови апаратури (сух бокс окомплектован със стереомикроскоп, реактор за синтез под налягане, вакуум сушилня, лабораторен реактор окомплектован с вакуум помпа и охлаждащ циркулиращ термостат, термопрограмируема муфелна пещ до 1400 °С; терморектор, оптичен микроскоп, аналитични везни, термопрограмируеми тръбни пещи и др.). Постигнатите устойчиви резултати през 2021 г. са добра основа за развитие и утвърждаване на ИОНХ като водещ национален изследователски и иновационен център по химия на материали и процеси с екологична насоченост 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“, професионално направление 4.2 „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 изпълнява **Национална програма „Европейски научни мрежи“** с проект „Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam). Дейностите по проекта, в 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) допринасят за повишаване на научно-изследователския и технологичен потенциал на учените в ИОНХ и за привличане на нови (4-ма) млади учени в областта на химия на материалите за чисти технологии.

В изпълнение на една от приоритетните дейности на НСРНИ в РБ, Стълб 3 „Концентриране на научната инфраструктура и изследователския капацитет в значими за икономиката направления и синергията между тях“, а именно приоритетни 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 (четвърта 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 (трета година) като партньор.

➤ **Два научни инфраструктурни проекта** по национална пътна карта (партньор): ИИФРАМАТ (2018-2023) „Разпределена инфраструктура от центрове за производство и изследване на нови материали и техните приложения, както и за консервация, достъп и е-съхранение на артефакти (археологически и фолклорни)“ и СЕВЕ-ЕССЕЛ (2018-2021) “Съхранение на енергия и водородна енергетика“ за обновяване, разширяване и поддържане на научната апаратура в ИОНХ.

➤ **Участие на ИОНХ в четири национални научни програми към МОН** в съответствие със Специфична цел 6 „Повишаване на количеството и качеството на научните изследвания, свързани с проблеми от национално значение“:

1. „**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”.

2. „**Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот**“ Компонент 2 „Растително здраве и безопасност в хранителните системи“, по проблем: Грижи за здравето на хората.

3. „**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)“.

4. „**Млади учени и постдокторанти**“ - 5 проекта на ИОНХ.

➤ 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 **10** проекта, **ИОНХ е водеща организация**. **12** учени са включени с лично участие в проекти на ФНИ и **4-ма** учени участват в други проекти.

В подкрепа на качествени научни изследвания в България на високо европейско ниво е изпълнението на проект по **Националната научна програма „Върхови изследвания и хора за развитие на Европейската наука“ Вихрен (ФНИ)**, модул „Водещ учен“ на тема „Синергизъм между катионни и анионни редокс реакции при материали с колосален интеркалационен капацитет“ (CARiM) от учени в Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“.

➤ ИОНХ е член на Сдружение с нестопанска цел „Регионален иновационен център за мехатроника и чисти технологии“, гр. Бургас (от 2020 г.).

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.

✓ 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 българската наука в Европейското изследователско пространство, в изпълнение на НСРНИ 2017-2030.

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 2021 г., **4-ма млади специалисти** са привлечени на работа в ИОНХ по проекти. В рамките на компонента 2 от бюджета на ИОНХ се извършва диференцирано заплащане на членовете на Института в зависимост от постигнатите резултати и атестацията на учените на всеки три години. През 2021 г. мобилността бе силно ограничена заради

пандемичната обстановка и наложените ограничения. Реализирани са **74 командировки** основно в страната за участие в научни форуми и работни срещи.

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).

Съгласно хоризонтална дейност 2. *Синхронизирани изменения в нормативните актове, свързани с изпълнението на стратегията*, през 2021 г. в ИОНХ е актуализиран научно-изследователският план на ИОНХ за 2021-2024 г. и е проведен избор на ръководители на 9-те Лаборатории в ИОНХ. През 2021 г. ИОНХ получи акредитация за докторската програма по Теоретична химия, актуализирани са докторските програми и общият учебен план по петте акредитирани докторски програми в ИОНХ. Благодарение на добрата организация, стриктното спазване на разработените нормативни COVID-19 мерки, умелото използване на закупената платформа WEBEX и възможните онлайн средства, изпълнението на проектите и планираните изследвания в ИОНХ беше успешно в ситуацията на пандемичната обстановка.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности

- За поредна, заключителна година, ИОНХ участва в изпълнението на четири 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". По тази програма, работният колектив приключи дейността си и разработи два аналитични доклада „Приносът на пост-литиево йонните батерии за ускоряване на прехода към нисковъглеродна икономика“ и „Съвременни и перспективни методи за улавяне, съхранение и оползотворяване на CO₂“. Докладите са публикувани от Издателство на БАН „Проф. Марин Дринов“. 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. В резултат на изследването през 2021 г. е оценено качеството на водите на река Искър и на три нейни притока (река Лесновска, река Какач и река Блато) в района на Софийско поле чрез прилагането на разработен комплексен подход, включващ експериментални полигонали и лабораторни изследвания и термодинамично моделиране на формите на елементите. По програма „**Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот**“ учени от ИОНХ участват в РП 2.4 „Възобновяеми биологични ресурси в стопанските единици“ с научна задача „Анализ на възможностите и наличните технологии за преработка и рециклиране, както и предлагане на съвременни иновативни технологични решения за приоритетните за страната биоресурси“.

- Ползата за обществото от научно-приложните и иновационни дейности на ИОНХ е пряко свързана с разработване на неорганични материали за безопасно съхранение на енергия, за интелигентни оптични приложения, на биоматериали с приложение в ортопедията и денталната медицина в отговор на подобряване на здравния и социалния статус на 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 са разработените технологии за оползотворяване на природни ресурси, в частност морски луги и доставяне на пазара продукти за козметика/медицинска козметика. Оценка за

качеството на тези продукти са нарстващите поръчки от бизнеса за производство и разработка на нови козметични продукти на основата на луга.

- Учен от Лаборатория ССПР е член на Обществен съвет на гр. Бургас за опазване на Атанасовско езеро и на Консултативен съвет за Поморийското езеро и със своята компетентност участва активно в мероприятията за опазване и съхраняване на езерата.

- Извършването на **сервизни анализи**, консултации и експертизи за нуждите на фирми подпомагат икономическото и индустриално развитие на страната. Например, по поръчка на фирмата Мелексис България – ООД са изследвани материали за интегрални схеми с помощта на Рентгенова фотоелектронна спектроскопия, а за фирмата Сика България ЕООД са анализирани добавки за бетон чрез ИЧ спектроскопия.

Подготовка на висококвалифицирани специалисти. Обучението на млади учени, постдокторанти, докторанти и студенти в областта на химия на материалите е дейност, съпътстваща научната с изявен обществен ефект. ИОНХ предоставя своята инфраструктура на студенти и докторанти от други научни организации за извършване на специализирана научна дейност и така допринася за създаването на висококвалифицирани кадри, които са конкурентноспособни на пазара на труда, както в България, така и в чужбина. През 2021 г. в ИОНХ се обучават докторанти на ХТМУ-София, ФХФ-СУ, ИЕЕС-БАН, ИЕ-БАН и ПУ в рамките на 6 съвместни докторантури. В Института е подготвена една дипломна работа за магистърска степен на студент от ХТМУ-София на тема „Влияние на Мо върху фазовото разслояване и кристализационните процеси в моделни боро-силикатни стъкла използвани за съхранение на радиоактивни отпадъци“. Многобройните проекти в ИОНХ дават възможност за привличане на млади специалисти и студенти за тяхното изпълнение, като те биват назначавани по проекти или на щатно място. Въпреки предоставените финансови възможности и научна среда, научната работа остава неатрактивна за младите висшисти заради ниско-конкурентен финансов статут в перспектива.

Обществени изяви за популяризиране на научните постижения.

- Участие на учени от ИОНХ (М. Ганчева, Т. Бояджиева, М. Калъпсъзова, Р. Стоянова) в Софийски фестивал на науката 2021 г. с цел разпространение на резултатите от изследванията в ИОНХ пред широката общественост. Научната дейност на ИОНХ беше представена под формата на постери, брошури, демонстрации и експерименти на щанд „Нови технологии с Институт по обща и неорганична химия“, а проектът CARiM на проф. Радостина Стоянова по програма ВИХРЕН бе представен на щанд „Фонд Научни изследвания“.

<https://www.britishcouncil.bg/sofia-science-festival/experiments/discover-zone>

- Интервю с чл.-кор. Константин Хаджииванов по БТВ радио „Българи са сред най-добрите учени в света“, водещ Т. Захариева в предаването "Важното, казано на глас".

<https://btvradio.bg/vajnoto-kazano-na-glas/balgari-sa-sred-naj-dobrite-ucheni-v-sveta.html>

- Интервю на проф. Радостина Стоянова „Науката ни е на високо ниво, но има нужда от лобирание“, отразено от списание „Наука“.

<https://nauka.bg/naukata-visoko-nivo-ima-nujda-lobirane/>

- Участие в медийно предаване на Програма Хоризонт "Рано в неделя" на ас. Нина Нанкова: „Светът няма да остане без учени“.

<https://bnr.bg/radiobulgaria/post/101569762>

- Интервю за БТВ радио - "Стартира кандидатстването за престижните награди „За жените в науката“ за 2022" на гл. ас. д-р Мария Калъпсъзова в предаването "За града" с Тереза Захариева.

<https://btvradio.bg/intervuta/za-grada/startira-kandidatstvaneto-za-prestizhnite-nagradi-za-zhenite-v-naukata-za-2022.html>

➤ Колектив от учени от ИОНХ публикуваха две научно-популярни статии в Списанието на БАН върху химия на материали в ИОНХ и екологичната оценка като средство за решаване на обществените предизвикателства; „Екологична оценка, динамика и акумулация на преходни метали в моделни и природни обекти на екосистемата вода - почва - растителност. Оползотворяване на растителни биоресурси“ и „Химия на материалите в Института по обща и неорганична химия - иновативен дизайн за решения на обществени предизвикателства“. Публикациите са по повод 60-годишнината на ИОНХ през 2020 г.

В резултат на високо обществено признание през 2021 г.

➤ ИОНХ бе удостоен с почетно отличие - плакет на БАН „Марин Дринов“ по случай отбелязване на 24 май – Денят на светите братя Кирил и Методий.

➤ Проф. д-р Константин Хаджииванов бе избран за академик в БАН в направление Химически науки.

➤ Учени от ИОНХ, академик проф. д-р Константин Хаджииванов и проф. д-р Радостина Стоянова, както и асоцииран член проф. д-р Михаил Атанасов са сред първите 2% от милиони други учени по света според световната класация на Станфордския университет в съответните тематични области „Физикохимия“, „Енергия“ и „Неорганична и ядрена химия“.

➤ Двама млади учени от ИОНХ (гл. ас. д-р Мария Калапсзова и ас. Нина Стоянова-Нанкова) в оспорвана конкуренция спечелиха престижната национална стипендия „За жените в науката“ 2021 по Програмата на L'Oréal и ЮНЕСКО. Проектът на Мария е съсредоточен върху разработване на по-ефективни и евтини материали за съхранение на зелена енергия и по-специално върху иновативни натриево-йонни батерии. Проектът на Нина е фокусиран върху изследването на растението *Graptopetalum paraguayense* и неговите потенциални лечебни свойства срещу човешки коронавируси.

1.4. Взаимоотношения с други институции

В рамките на проект Европейски научни мрежи TwinTeam на ИОНХ, през 2021 г. международното сътрудничество се осъществяваше с три водещи научни организации от Англия, Германия и Испания.

Учени от ИОНХ си сътрудничиха с университети и други институти в България основно в направления енергийни ресурси, енергийна ефективност, нанонауки, нови материали и технологии 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 от 6 института на БАН и Югозападен Университет

➤ научни инфраструктурни, национални научни програми и съвместни проекти на ФНИ (20) с партньори: Висши училища (ФХФ-СУ, ХТМУ-София, ФзФ-СУ, Селскостопанска академия - Институт по почвознание, агротехнологии и защита на растенията, Пловдивски университет, МГУ-София, ТУ-София, ЮЗУ „Неофит Рилски“, Русенски университет – клон Разград) и Институти на БАН (ИЕЕС, ИОХЦФ, ИФХ, ИП, ИЕ, ИМК, ИОМТ, ИКИТ, ИК, ИЕМПАМ).

➤ многобройните съвместни публикации.

Учени от ИОНХ участват в **експертни органи** в областта на науката и висшето образование. По-важните са: Постоянна комисия по природни науки, математика и информатика към Националната агенция за оценяване и акредитация (НАОА) (проф. д-р Е. Жечева), Постоянна Научно-Експертна Комисия по Химически науки (ФНИ-МОН) (член, проф. д-р Н. Трендафилова), национален представител в IUPAC Division VI,

Chemistry and the Environment (доц. д-р Стефка Тепавичарова), титулярен член в IUPAC Division V, Analytical Chemistry (проф. Христо Баларев, гост-професор на Лабораторията ССПР, членове на комисията Subcommittee on Solubility and Equilibrium data (проф. д-р Христо Баларев и доц. д-р Стефка Тепавичарова), национален делегат на Division of Computational and Theoretical Chemistry of European Chemical Society (проф. д-р И. Георгиева).

Експертизи в помощ на институции и органи на управление. През отчетния период, съвместно с колеги от ГИ-БАН, ИБЕИ-БАН и ИПАЗР „Н. Пушкиров“, е изработена комплексна експертиза по Досъдебно производство №48/2018 на ОП – Ямбол 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. Експертизата е предадена на следовател Галя Казакова от Окръжния следствен отдел на Прокуратура в Ямбол (гл. ас. Х. Цветкова-Василева).

Участие на учени от ИОНХ в органи на управление на научни учреждения, организации и ВУ: Национален координационен съвет по нанотехнологии (проф. д-р Д. Ковачева), Управителен съвет на Българско кристалографско дружество (доц. д-р П. Цветков).

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

Рецензии и становища по процедури. Учени от ИОНХ са ценени и търсени експерти и през 2021 г., 12 учени от тях са изготвили **29** рецензии и становища по процедури за научни степени и академични длъжности към ИОНХ, Институти (ИМК, ИОХЦФ, ИК, ИП) на БАН, ФХФ-СУ и ХТМУ-София. Изготвени са **3** рецензии на дипломни работи за магистърска степен на студенти от ХТМУ, **9** рецензии по проекти на ФНИ и други научни организации и **135** анонимни рецензии на статии за специализирани списания (от 19 учени на ИОНХ).

Международни мрежи и организации. ИОНХ участва в Европейска научна мрежа с проект “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam).

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 = 13.273) (заместник главен редактор), Materials, Open Engineering, International Journal of Advances in Chemistry Recent Patents on Materials Science, Current Smart Materials, Asian Journal of Nanosciences and Materials; Materials Today: Proceedings (3-ма гост-редактори), Catalysis-MDPI, Materials-MDPI;

- *организационен комитет на научен форум*: международна научна конференция SizeMat3, Европейска конференция по компютърна и изчислителна химия (The European Conference on Computational and Theoretical Chemistry).

1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата

1.5.1. Практически дейности:

С наличното оборудване в ИОНХ са извършвани **сервизни услуги и анализи** за други институти на БАН (ИФХ, ИЕЕС, ИМК и ИИХ) и български университети (ХТМУ, НИС-СУ, Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас). За нуждите на бизнеса са направени анализи за сертифициране на продукцията, контрол на суровини и технологични процеси за фирмите Мелексис България – ООД, Сика България ЕООД, Сенсата Технолоджи ЕООД, Алианц България ЕАД, Зеолин ЕООД, Октопод инвест холдинг ЕАД, МЦ Уроелит.

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

➤ Изследват се процесите за получаване на структурирани (монолитни) паладий – съдържащи катализатори, модифицирани с метални оксиди, нанесени върху индустриален носител за работа в реакции на окисление на летливи органични съединения в отпадни газове.

➤ Изграждат се многореакторна и пилотна експериментални системи за изследвания на термичната стабилност и устойчивост на катализатори в присъствие на каталитични отрови.

➤ Във връзка с изследванията върху устойчиво използване на морските ресурси, в ИОНХ продължава **разработването на иновативни продукти и технологии** на основата на химическите ресурси на Черно море и организирането на малки производства на натурална медицинска козметика, която се предлага в страната и чужбина. През 2021 г. „Лаборатория по солеви системи и природни ресурси“ - Бургас разработи и внедри 1 нов козметичен продукт. През 2021 г. е сключен 1 нов договор за продукти с марката Sea Stars с чуждестранен партньор, Vengard UK Ltd – Англия. 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 и в една национална програма „Млади учени и постдокторанти“ като дейностите и резултатите за 2021 г. се представят в цялостния отчет на програмите към МОН

Проекти по ННП на МОН	Водеща организация	Координатор от страна на ИОНХ
„Европейски научни мрежи“ с проект “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam)	ИОНХ	проф. д-р Радостина Стоянова
„Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта” ЕПЛИОС	БАН	проф. д-р Радостина Стоянова
„Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“,	БАН и СУ	проф. д-р Диана Рабаджиева

„Здравословни храни за силна биоекономика и качество на живот“	Аграрен университет, Пловдив	доц. д-р Паунка Новачка
--	------------------------------	-------------------------

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2021

2. Резултати от научноизследователската дейност през 2021 г.

Основните резултати от научно-изследователската дейност на Института следват темите и задачите от научно-изследователския план на ИОНХ 2021-2024 г.

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

Интеркалационни съединения и сложни оксиди като електродни материали за литиево-йонни батерии и пост-литиево-йонни батерии

Тази тема се разработва от учени от Лаборатории „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и „Кристалохимия на композитни материали“.

➤ Концепцията за постигане на колосални интеркалационни капацитети бе доказана експериментално, чрез въвеждането на CeO_2 като уникален модификатор на слоести оксиди. CeO_2 участва индиректно в интеркалационната реакция чрез осигуряване на обратима обмяна на кислород със слоестия оксид. По този начин се потискат страничните реакции на решетъчния кислород на оксида при пълно деинтеркалиране на алкалните йони, което води до нарастване на стабилността на капацитета при многократно циклиране. Най-яркото доказателство за това са стабилностите на капацитети по отношение на ко-интеркалацията на Li^+/Na^+ и на отделните Li^+ и Na^+ йони. Трябва да се отбележи, че тези наши изследвания нямат аналог в литературата.

➤ Показано е, че съвместните катионни и анионни редокс реакции при интеркалация на Li^+/Na^+ йони в слоестия оксид $\text{Na}_{2/3}\text{Ni}_{1/2}\text{Mn}_{1/2}\text{O}_2$ се контролират ефективно чрез селективното заместване на никелови йони с електрохимично неактивни йони Ti^{4+} и Mg^{2+} . Вграждането на Ti^{4+} йони в слоестата структура на оксида води до постигането на по-големи капацитети при интеркалиране на Na^+ и Li^+ , докато Mg^{2+} йони имат положителен ефект върху интеркалацията само на Li^+ . По отношение на интеркалацията на натрий, заместените с магнезий оксиди се отличават с по-малък капацитет, но с изключителна стабилност на капацитета при многократно циклиране. Благодарение на новозакупената апаратура – сух ръкавичен бокс MBraun (H_2O , $\text{O}_2 < 0.1$ ppm), бе възможно да се проследи електрохимичното поведение на оксидите при използване на влагочувствителни електролити на основата на йонни течности.

➤ На базата на хидротермални реакции е разработен нов метод за получаване на натриеви титанати под формата на нанотръбички. Изследвано е влиянието на различното налягане (от автогенно до 60 bar) и газовата атмосфера върху стехиометрията и морфологията на натриево-титановите оксиди. Проведените първоначални електрохимични тестове показват, че натриевите титанати се отличават с отлични електрохимични характеристики, което ги прави перспективни анодни материали за натриево-йонни батерии.

➤ Детайлно са изучени електрохимичните свойства в галваностатичен и потенциостатичен режим на тунелен тип натриево-железен фосфат-пирофосфат, $\text{Na}_4\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2\text{P}_2\text{O}_7$, и окислен марицитен тип натриево-железен фосфат като катодни материали в натриеви и литиеви йонни клетки. Изследван е механизмът на

интеркалация на алкалните йони при тях.

➤ За първи път при тези електродни материали е проследено и оценено влиянието на различни имид-базирани и конвенционални (PF₆-базирани) натриеви и литиеви електролити върху електрохимичните характеристики. Намерено е, че имид-базирани електролити благоприятстват протичането на последователна интеркалация на алкалните йони в различните кристалографски места в структурата на натриево-железния фосфат-пирофосфат като електрохимичните характеристики при циклиране в натриевите клетки превъзхождат тези при литиевите.

➤ Демонстрирано е, че марицитен тип NaFePO₄ е електрохимично неактивен, но окисляването му при меки условия след механохимичното смилане с въглеродни сажди, води до трансформирането му в електрохимично-активна наноразмерна насиконова фаза с висок специфичен капацитет (между 100 и 150 mAh/g), висока циклична стабилност и отлична стабилност на капацитета при високи токови натоварвания, особено в натриеви йонни клетки. В литиеви йонни клетки се постига много по-висок начален специфичен капацитет, но цикличната стабилност при високи токови натоварвания е по-лоша.

➤ Получени са нови данни за електрохимичните свойства на натриево-железни фосфати със структура тип НАСИКОН, алуаудит и слоеста структура, използвани като катода в натриеви и литиеви йонни клетки.

➤ Изследвано е структурното преобразуване на алуаудитната фаза натриево манганов сулфат, Na₂Mn₂(SO₄)₃, в орторомбичната фаза литиево манганов сулфат, Li₂Mn₂(SO₄)₃. Независимо от структурните различия, този преход протича когато алуаудитната фаза се използва като катод в литиеви полу-клетки. Благодарение на нано-структурирането, генерираната *in-situ* орторомбична фаза показва по-висок капацитет от фазата получена преди електрохимичния експеримент.

➤ Използвайки метода на лиофилизация е получена при меки условия двойната сол литиево манганов сулфат, Li₂Mn₂(SO₄)₃, с орторомбична структура. За първи път е показано, че орторомбичната фаза Li₂Mn₂(SO₄)₃ може да интеркалира обратимо най-малко 1 mol Li само в случаите, когато се използва електролит на базата на йонна течност.

➤ Съвместно с колеги от ФХФ-СУ са проведени електрохимични изследвания върху поръозен калай, получен чрез електрохимично разтваряне на сплав със състав Zn₇₀Sn₃₀, който е тестван като катод без проводящи добавки и свързващо вещество в натриеви и литиеви йонни клетки. Добрата механична стабилност на катодния материал, работещ на базата на сплавяне, осигурява сравнително високи специфични капацитети (440 и 250 mAh/g, съответно в литиеви и натриеви йонни клетки) като цикличната стабилност е по-добра в натриевата клетка.

➤ Процесите протичащи на интерфейса електрод/електролит са симулирани чрез изследване на адсорбцията на моно- и биядрени комплекси на Li⁺, Na⁺ и Mg²⁺ с ограничен брой молекули на разтворителя на етилен карбонат (ЕС) върху (111) повърхността на литиево-титанов шпинел, като се отчита наличието на противойона PF₆⁻. Наред с адсорбцията на катионите бяха проследени няколко реакции на разпадане на молекулата на ЕС и противойона. Въз основа на получените резултати е предсказано, че реакциите на отделяне на газ при контакта на шпинела с карбонатни електролитни разтвори се потискат в смесени електролити, като по този начин смесените електролити могат да превъзхождат електролитите съдържащи един катион по отношение на безопасна работа на батерията.

➤ Разработена е нова методика за *in-situ* изследване чрез ЕПР на механизма на електрохимичната стабилност на неводни електролитни разтвори. Благодарение на тази методика е проследено формирането, развитието и стабилността на радикалите в конвенционални литиеви електролити в зависимост от електрохимичния прозорец и наличието на нови добавки.

➤ Чрез ЕПР е изследван механизмът на интеркалация на магнезий в тригонален натриево-ванадиев фосфат, $\text{Na}_5\text{V}(\text{PO}_4)_2\text{F}_2$. Показано е, че магнезият се интеркалира обратимо в $\text{Na}_5\text{V}(\text{PO}_4)_2\text{F}_2$ благодарение на редокси двойките $\text{V}^{4+}/\text{V}^{3+}$ и $\text{V}^{5+}/\text{V}^{4+}$, при което се отделя голям специфичен капацитет (136 mA h g^{-1}). Установените електрохимични характеристики на натриево-ванадиевия фосфат го превръщат в нов клас електроди за презаредими магнезиеви батерии. Тези изследвания се провеждат съвместно с учени от Университета в гр. Кордоба.

➤ Изследванията на структурните особености и електрохимично поведение на $\text{LiNi}_{0.85}\text{Co}_{0.10}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ (NCM85) демонстрираха, че легирането с високозареден катион Mo^{6+} (1 ат.%) води до значително стабилизиране на циклируемостта, повишена скорост на заряд/разряд, понижаване на хистерезиса на напрежението и импеданса в Li-клетки с този катоден материал в сравнение с нелегирания. Включването на Mo като допант в структурата на NCM85 се извършва чрез *in situ* подход при синтеза, като се използва амониев молибдат като прекурсор. От рентгеновите дифракционни изследвания беше установено, че Mo замества Ni, в структурата, но се локализира предимно в приповърхностния слой на зърната, като част от него сегрегира и на повърхността и по границите на зърната на оксидната фаза.

Хибридни материали за суперкондензаторни системи

По тази тема работят учени от Лаборатории „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“

➤ Съвместно с учени от ИЕЕС-БАН е проведено сравнително изследване върху манган-никел съдържащи оксиди, хидроксиди и фосфати като хибридни суперкондензатори. Получените данни за специфичния капацитет, цикличната стабилност и енергийна плътност превъзхождат литературните данни за подобни системи, което ги определя като обещаващи материали за електрохимични устройства за съхранение на енергия.

➤ Капацитивните свойства на въглеродни материали получени от биомаса са изследвани заедно с учени от ИЕЕС-БАН в симетрични суперкондензатори чрез използване на органични литиеви и натриеви електролити. Посредством *post-mortem* анализи с рентгенова фотоелектронна спектроскопия е показана различната роля на повърхностните функционални групи на въглеродните материали. Получените корелации биха могли да се използват при проектиране на суперкондензатори с голяма плътност на енергията.

Нанокмпозитни материали за акумулиране на водород

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

➤ Изследвани са смесени системи на магнезий и никел дотирани с ванадий и титан като материали за акумулиране на водород. В резултат е получен материал със състав $\text{Mg}_{2.1}\text{Ni}_{0.7}\text{V}_{0.3}$, който се характеризира с много добра кинетика на хидриране и висок абсорбционен капацитет - за 3 мин. при 300°C и 1 МРа се достига абсорбционен капацитет от 3.3 мас. % H_2 .

➤ Влиянието на процеса на механоактивиране върху степента на аморфност и на формиране на нови фази е изучено с помощта на *ex-situ* рентгенофазов анализ и са определени най-подходящите условия на синтез. При по-меки условия от известните в литературата е синтезиран троен хидрид от типа Mg_2NiH_4 , представляващ смес от две полиморфни модификации - моноклинна и орторомбична.

Интелигентни оптични системи на основата на стъкла, керамики и органометални съединения

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

Основната част от 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 нови многокомпонентни $WO_3-La_2O_3-B_2O_3-Nb_2O_5$ стъкла, дотирани с 1 mol% Eu_2O_3 и е изследвано влиянието на структурата на стъклената матрица, върху луминесцентните свойства на активния Eu^{3+} йон. Установено е, че поради компактната си и хомогенна структура, стъклото с най-ниско съдържание на Nb_2O_5 (5 мол.%) се характеризира с най-високо интензивна червена емисия на Eu^{3+} йоните при 613 nm и е обещаващ кандидат за приложения като източник на червена светлина. Прогресивното клъстериране на NbO_6 с увеличаване на съдържанието на Nb_2O_5 е основната причина за понижената луминесцентна ефективност на Eu^{3+} йоните внедрени в стъклата с по-високо съдържание на Nb_2O_5 .

➤ Изследван е ефектът на WO_3 върху стъклообразуването, структурата и фотолуминесцентните свойства на двукомпонентни $ZnO-B_2O_3$ стъкла, дотирани с различно количество Eu_2O_3 . Добавянето на 10 mol% WO_3 към двукомпонентното $50ZnO.50B_2O_3$ стъкло доведе до преодоляване на течно-фазовото разслояване (ликвация) и до получаването на хомогенно, прозрачно обемно стъкло. W^{6+} йоните се вграждат в цинково-боратната аморфна мрежа основно като WO_6 октаедри, свързани помежду си чрез общи върхове. Формирането на ръбови връзки между WO_6 групи при по-голямо съдържание на WO_3 е основната причина за повишената тенденция към кристализация на тези състави. Установено е, че синтезираните стъкла и стъклокерамики съдържащи кристалната фаза $ZnWO_4$ са подходящи матрици за внедряване на Eu^{3+} йони, характеризират се със силно интензивна червена емисия и са подходящи обекти за разработване на оптични материали с червена емисия във видимата област.

➤ Чрез кристализация от високотемпературни разтвори са получени дотирани с Eu^{3+} , Tb^{3+} и Dy^{3+} монокристали от фазите Li_2CaGeO_4 , Ca_2GeO_4 и $Ca_5Ge_3O_{11}$. Определени са реалните концентрации на редкоземните йони в монокристалите и са изчислени коефициентите на разпределение. При Li_2CaGeO_4 , концентрацията на редкоземните йони е най-ниска, а при Ca_2GeO_4 - най-висока. Емисионните спектри на монокристалите съдържат характеристичните линии за всеки от дотиращите йони. Разцепването на линиите зависи от конкретната структура на матрицата. С цел получаване на стъклокерамики, за термично третиране са избрани три различни

състави стъкла от система $\text{CaO-GeO}_2\text{-Li}_2\text{O-B}_2\text{O}_3\text{-Re}_2\text{O}_3$ ($\text{Re}^{3+} = \text{Tb}^{3+}, \text{Eu}^{3+}, \text{Dy}^{3+}$). Режимът на термично третиране е определен на базата на получените ДТА криви. Емисионните спектри на предварително получените образци се доближават повече до спектрите на стъклата. Разцепването на различните емисионни линии зависи от структурата на кристализиращата фаза.

➤ Съвместно с колеги от „Център за полимерни и въглеродни материали“ към Полската академия на науките в гр. Забже, бяха направени детайлни изследвания на 5 броя образци от стъкловъглерод след престой на Международната Космическа Станция. Първоначалният анализ на базата на сканираща електронна микроскопия (SEM), инфрачервена (IR) и Раманова спектроскопия, показва много слабо влияние на космическите условия върху структурата и микроструктурата на стъкловъглеродния слой в сравнение с референтните образци на Земята.

➤ Получени са хомогенни и гладки фотолуминесцентни Sm^{3+} - ZrO_2 зол-гел филми. Допантът Sm съдейства за стабилизиране на тетрагоналната ZrO_2 фаза. Анализите доказаха наличието на въглеродни примеси и различни дефекти (F^+ центрове, Zr^{3+}) в структурата на филмите, които индуцират фотолуминесценция (PL). Sm-дотиран (0.5 at%) ZrO_2 показва най-висок интензитет на PL емисията. Червеното отместване в PL спектър определя потенциалната употреба на този материал във фотониката и по-специално в белите светодиоди.

➤ Изследвани са стъклообразни проби от две системи със състави 1: $(100-x) \cdot (0.16\text{Na}_2\text{O}-0.10\text{CaO}-0.74\text{SiO}_2) \cdot x\text{Fe}_2\text{O}_3$, $x = 5, 10, 15, 20$ % и 2: $16\text{Na}_2\text{O}-10\text{CaO}-(74-x)\text{SiO}_2-x\text{Fe}_2\text{O}_3$, $x = 5, 10, 15, 20$ %. Проследена е еволюцията на спектрите в зависимост от количеството Fe_2O_3 в стъклото. За съставите 1, съдържащи 5, 10 и 15% Fe_2O_3 , е установено съвместно съществуване на Fe^{2+} и Fe^{3+} състояния като Fe_2O_3 , както и на Fe_2SiO_4 . За стъкла, съдържащи 20 % Fe_2O_3 , желязото присъства предимно в Fe^{3+} състояние. За изследваните състави 2 е установено, че желязото е смес от състояния на Fe^{3+} и Fe^{2+} . Съществуването на Fe_2O_3 е възможно, за разлика от Fe_2SiO_4 . Двете системи стъкла са изследвани и след термично третиране в продължение на 3ч и 7ч. За тях енергията на свързване и формата на Fe_{2p} линията са типични за съществуването на Fe^{3+} и Fe^{2+} състояния, най-вероятно като Fe_3O_4 . Изключено е съществуването на друга желязосъдържаща фаза.

➤ Монофазни продукти от CaWO_4 и CoWO_4 бяха получени чрез директен механохимичен синтез, за 1 час механично активиране при 850 оборота. Двата образца се характеризират с емисия в синята (CaWO_4) и виолетовата (CoWO_4) област на видимия спектър. Установено е, че ширината на забранената зона (от 1.97 до 2.07 eV) както и интензитетът на емисията нарастват с увеличаване времето на активиране след 5 часа при 850 оборота за CoWO_4 . Определени са и цветните координати за CaWO_4 и CoWO_4 .

➤ Чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия са изследвани промените на повърхността на керамики от AlN, вследствие на обработка с наносекунден Nd:YAG лазер. Установено бе, че лазерната обработка води до увеличаване на количеството на металния Al, докато компонентът, свързан с Al-N намалява. Върху повърхността на

керамиката от AlN се формира проводящ слой с периодична структура. Съвместните изследвания с ИЕ показват, че изследваните материали могат да бъдат в основата на производство на алуминиеви микро- и наноструктури с потенциални приложения в електрониката и фотониката.

Нанокмпозитни материали с биомедицинско приложение

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

➤ Получени са два типа нови хибридни материали на основата на слабокристален хидроксиапатит и съответно цвитерийонните полимери поликарбоксибетаин и полисулфобетаин. Установено е, че заместването на карбоксилатната група (-COO-) в поликарбоксибетаина със SO₃ – групата в полисулфобетаина води до понижаване съотношението Ca/P в неорганичната апатитна фаза, поради промяна в комплексообразуващите свойства на полимерните молекули в изходните разтвори. Получаването на хибридни материали в среда на физиологичен разтвор (0.9 % NaCl) стабилизира полимерния хидрогел и повишава съдържанието на полимера в хибридният материал. Новите материали са охарактеризирани чрез XRD, СЕМ, ИЧ и твърдотелен ЯМР и предстои тестването им като реминерализационни агенти на зъбен емайл.

➤ Изследвано е поведението на двойно дотиран (0,4 мол% Zn²⁺ и 7,5 мол % Mg²⁺ йони) аморфен калциев фосфат в среда на изкуствена слюнка с оглед използването му като компонент за нови хибридни материали за реминерализация. Експериментите са проведени при съотношение твърда фаза: изкуствена слюнка = 0.25:15 г/мл, температура 37 °С и рН 6.3 в статичен режим. Резултатите показват едновременно протичане на процесите разтваряне/кристализация/рекристализация, водещи до отделяне на Mg²⁺ йони, достигащо до 15 мас % от изходното количество в аморфната фаза за 72 ч, и трансформиране на аморфната фаза в слабокристален хидроксиапатит в рамките на 1 час, чиято кристалност слабо се повишава с течение на времето. Отделяне на Zn²⁺ йони не беше регистрирано. Понижаването на концентрациите на Ca²⁺ и PO₄³⁻ йони в изкуствената слюнка в първите 6 ч и изменението на съотношението Ca/P в твърдата фаза е индикация за възникване на ново зародишообразуване на калциево фосфатна апатитна фаза.

➤ С цел получаване на субстрат за изследване на потенциала за реминерализация на новосинтезирани калциево-фосфатни системи бяха синтезирани два калциево фосфатни апатитни материала чрез метода на мокро химическо утаяване и последващо третиране при 80 и 500 °С. Резултатите от твърдотелен ЯМР и термичен анализ показаха, че частиците са изградени от ядро от нанокристален хидроксиапатит, покрито с хидратна обвивка, съдържаща не само H₂O молекули, но и HPO₄⁻ и CO₃²⁻ йони, характерни за зъбния емайл.

➤ По оригинален метод са получени нанокмпозити от редуциран графенов оксид със сребърни и медни наночастици. Получените композити бяха охарактеризирани структурно и морфологично. Металните наночастици са със среден размер около 20–40 nm и са хомогенно разпределени по повърхността на редуцирания графенов оксид. Новият смесен Cu-Ag-RGO нанокмпозит проявява засилено антибактериално въздействие срещу бактериите *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* и гъбичките *Candida albicans*, което не може да се обясни с кумулативния ефект на отделните медни и сребърни наночастици, а по-скоро със синергичен ефект, благоприятстван от типа на носителя.

➤ По методите на праховата металургия (ПМ) са получени 5 типа многокомпонентни сплави на кобалтова основа. Изследвано е влиянието на съотношенията на компонентите: Co, Cr, Mo, W, Se, както и на метода на производство върху структурните, технологичните, механичните и биологични свойства на продуктите. При някои от образците е въведен азот в състава, под формата на азотиран Cr, с цел подобряване на механичните свойства. ПМ-методът на производство се отличава с висок икономически и благоприятен екологичен ефект, тъй като технологията е абсолютно безотпадна, като се избягват енергоемки процеси на стапяне и отливане при традиционния метод на високотемпературно сплавяне.

➤ Продължава сътрудничеството с колеги от Стоматологичния Факултет-Пловдив, с които са проведени сравнителни изследвания на разработените в ИОНХ сплави (по метода на праховата металургия (ПМ)) с произведени дентални сплави по методите на високотемпературно сплавяне и Selective Laser Melting (SLM). Като предимства на ПМ-метода са структурната хомогенност и постоянството на свойствата на получените дентални крайни продукти: метало - керамични конструкции (мостове, коронки и др.). Тестове за якост на опън показват превъзхождащи резултати за получените от нас сплави.

➤ В сътрудничество с групата на проф. Момеков от Фармацевтичен факултет на МУ, София са проведени биологични изследвания на получените от нас сплави на никелова и кобалтова основа. Резултатите показват, че изследваните сплави не проявяват цитотоксични ефекти и са безопасни за употреба. Проведените *in vivo* тестове не установяват дразнещ (irritant) ефект върху кожата на бозайници (ИСО 10993-10), както и наличие на забавен ефект на дермална контактна чувствителност.

➤ Посредством синтероване в защитна атмосфера при 2220 °C са получени образци от плътна SiC- керамик, с размери, подходящи за балистични изпитания. Установени са режими за уплътняване по механизма на синтероване в присъствие на течна фаза от разтопен Si.

➤ Съвместно с колеги от ФФ - МУ успешно са използвани мезопорести силициеви частици MCM-41 и HMS като нова платформа за продължителна доставка на противораковото лекарство бикалутамид. Наблюдавано е значително подобряване на *in vitro* противотуморната активност и *in vitro* цитотоксичност, като по-ефективен срещу рак на простатата е бикалутамид натоварен в HMS.

Капсулираното масло от риган в хитозан-алгинатни наночастици показва подобрени антибактериална активност и термична стабилност и е обещаващо като хранителна добавка с антимикробна активност. От друга страна, капсулираното масло проявява значително по-ниска *in vitro* цитотоксичност върху човешки кератинови клетки и *in vivo* тест за дразнене на кожа, отколкото чисто риганово масло и се счита за подходяща система за локално лечение на микробни инфекции на кожа и други меки тъкани. Това прави мезопорестите частици силициев диоксид обещаващ носител за доставяне на лекарства за хуманна употреба.

Перовскитни материали за преобразуване на енергия

Тази тема се разработва от учени от Лаборатории „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и „Кристалохимия на композитни материали“.

➤ Демонстриран е алтернативен подход за подобряване на термоелектричните свойства на оксидни материали. Той се състои в образуването на многофазни композити, в които индивидуалните компоненти имат огромни различия в електрическото съпротивление и термичната проводимост. Подходът е доказан при

образуването на композити между перовскити и слоеви оксиди на основата на кобалт. В резултат е постигната висока термоелектрична активност още при стайна температура (т.е. $ZT=0.34$ при 298 K).

➤ Хексагоналният перовскит $Ba_7Nb_4MoO_{20}$ показва отлична кислородна и протонна проводимост и химическа устойчивост в атмосфера на окисление и редуция. Тези особености ни провокираха да проучим възможностите за получаване на $Ba_7Nb_4MoO_{20}$ чрез твърдофазен синтез от различни прекурсори. Целта на изследването бе да се установи влиянието на изходните съединения ($BaCO_3$ срещу $Ba(NO_3)_2$ и две полиморфни модификации на Nb_2O_5 - моноклинна и орторомбична) върху температурата на синтеза и чистотата на получените продукти. Показано бе, че комбинацията от нитрат за бария и орторомбичен ниобиев оксид като изходни реагенти е най-добра за получаване на хомогенен $Ba_7Nb_4MoO_{20}$ при относително ниски температури.

➤ Изследвано е влиянието на частичното заместване на Bi от редкоземни елементи (RE) с различни йонни радиуси, върху структурните и морфологични свойства на феритната фаза. Установено е, че заместването с големи RE-йони запазва ромбедричната симетрия на $BiFeO_3$, докато заместването с по-малки RE-йони води до съвместно съществуване на две полиморфни перовскитни фази с ромбедрични $R3c:H$ и орторомбични $Pnma$ симетрии. Параметрите на елементарната клетка, както и междуатомните разстояния и ъгли около катиона и железните йони се влияят от заместването. Средният размер на кристалите и частиците намаляват с намаляването на йонния радиус на заместващия RE-йон.

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", "Интерметалиди и интеркалационни материали" „Кристалохимия на композитни материали" и „Електронна спектроскопия на твърди повърхности" и „Материали и процеси за опазване на околната среда".

➤ Получени са нови данни за структурните и каталитичните свойства и възможностите за приложение на серия от монокомпонентни Co и двукомпонентни Co–Se катализатори, нанесени върху SBA-15 за пълно окисление на метан, пропан и хексан. Установено е, че най-високата активност на еднокомпонентната кобалтова проба се дължи на нейната по-висока редуцируемост в резултат на по-ниско взаимодействие на кобалтовия оксид с носителя SBA-15. От друга страна, фината дисперсия на кобалтовия и цериевия оксид и тяхното силно взаимодействие в каналите на SBA-15 води до образуване на трудно редуцируеми оксидни фази и следователно по-ниска каталитична активност в сравнение с монокомпонентния катализатор от кобалтов оксид. Показано е, че синтезираната мезопореста структура може да предотврати агломерация на оксидните частици, което води до успешното разработване на нов и стабилен катализатор за намаляване на емисиите на парникови газове.

➤ Съвместно с колеги от Румъния и ИК-БАН са синтезирани и изследвани каталитичните свойства на PtCeTi-SBA-15 мезопорести катализатори с различно съдържание на платина. Проведени са изследвания върху пълно окисление на метан, хексан и пропан посредством методите на термопрограмируената редуция на пропан и

термопрограмируемата десорбция на кислород. Установено е, че най-добри каталитични свойства притежава пробата, съдържаща 1% Pt.

➤ Изследвано е пълното каталитично окисление на пропан върху Co-съдържащи ZSM-5 зеолити с различни съотношения Si/Al (23, 40 и 100). Установено е, че окислението протича при температури над 240°C, като най-висока каталитична активност е наблюдавана при образеца със съотношение Si/Al=23, което се обяснява с високата редуцируемост и по-слабото взаимодействие на кобалтовия оксид с носителя. Въз основа на проведените кинетични изследвания, като най-вероятен механизъм на реакцията е предложен този на Марс ван Кревелен. Получените резултати дават основание за по-нататъшно развитие на новите каталитични системи с приложение за намаляване на емисиите на парникови газове.

➤ Проведени са изследвания за пълно окисление на етан, бутан и н-хексан върху Co-съдържащи ZSM-5 зеолити. Въз основа на експерименталните данни за кинетика на реакцията и приложеното моделиране е предположено, че пълното окисление на н-хексан върху изследваните катализатори протича по механизма на Лангмюир-Хиншелвуд.

➤ Получени са данни за каталитичните свойства и възможностите за приложение на модифицирани с кобалт, манган, мед и кобалт-манганови оксидни катализатори в различни съотношения насени върху български природен зеолит клиноптиолит, за пълно окисление на бутан и н-хексан.

➤ Получени са нови данни за каталитичното окисление на метан върху Ni модифицирани Pd/Al₂O₃ катализатори. Установено е, че взаимодействието между NiAl₂O₄ и Pd частици предотвратява миграцията на Pd частици. Наблюдавано е, че на каталитичната повърхност се образува шпинелна фаза от NiAl₂O₄ и фино диспергирани Pd⁰ и PdO. Наблюдаваната близка каталитична активност на всички никел-модифицирани катализатори се обяснява с близка повърхностна концентрация на паладий, а високото съдържание на никел не води до значително повишаване на каталитичната активност.

➤ При изпълнение на съвместен проект с колеги от ИОХЦФ и ИК е установено, че фазовият състав, морфологията и разпределението на металните йони по подрешетки на наноразмерен кобалт-цинков заместен магнетит с различен състав, нанесен на въглеродна пяна, получена от отпадъци катран и фурфурол, могат лесно да бъдат настроени чрез вариране на състава на въглеродната пяна и съотношението Co/Zn в импрегниращия разтвор. По-високото количество фурфурол в прекурсора на въглеродната пяна промотира образуването на богати на кобалт шпинелни частици, дисперсни, по-достъпни и силно активни при разлагане на метанол до сингаз.

➤ Активен въглен от отпадна биомаса е използван като носител за наноразмерни Me заместени цинкови ферити (Me = Cu, Co, Mn, Ni), катализиращи разлагането на метанол като източник на водород. Катализаторите на база Cu- и Co-съдържащи ферити бързо се дезактивират поради агломерацията на активните частици и структурен колапс на активния въглен. При катализаторите на база Mn, редокс двойката Mn²⁺-Fe³⁺ промотира каталитичния процес при по-ниска температура в сравнение с другите заместени ферити. Наблюдаваната изключително висока каталитична активност за Ni-заместения ферит е свързана със синергичното действие на Ni и ZnO наночастиците, получени в реакционната среда.

➤ Съвместно с колеги от ФХФ - СУ е изготвена възпроизводима лабораторна технология за получаване на аерогели от силициев диоксид, подходящи за биологични

приложения. Демонстрирана е зависимост на степента на хидрофобност от текстурата, при бутилкообразни и плоско-паралелни пори. Установено е, че хидрофобизацията води до намаляване на специфичната повърхност, комбинирано с увеличение на средния размер и общия обем на порите.

➤ По метода на изгаряне от разтвор с различни органични горива са синтезирани наноразмерени шпинелни материали със състав $MnCoFeO_4$ и е изследвано каталитичното им поведение в реакцията на пълно окисление на n-алкани - метан, пропан и бутан. Резултатите показват, че структурните, повърхностните и морфологичните характеристики на шпинелите могат да бъдат предварително моделирани чрез вида на горивото. Шпинелите $MnCoFeO_4$ могат успешно да се прилагат при нискотемпературно окисление на въглеродороди.

➤ Чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия бяха изследвани каталитичните системи Ni-Co и Ni-Co-P, получени електрохимично в хлориден електролит за определяне на каталитичната способност по отношение на реакцията на отделяне на кислород. Анализът показва, че върху повърхността и на двете проби са налице хидроксилни групи, които могат да се припишат на съединенията $Ni(OH)_2$ и $Co(OH)_2$. Съдържанието на кислород и в двете проби е над 60 ат%, което се дължи на факта, че повърхностните слоеве на праховите частици са смес от оксиди и хидрооксиди с разнообразен състав, както показва и разлагането на спектрите на никела и кобалта.

➤ Чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия бяха определени повърхностният състав и химичното състояние на наночастици от $CaWO_4$, модифицирани с Pd, получени чрез директен механохимичен синтез и използвани за реакциите на пълно каталитично окисление на различни алкани и толуен. Установено е, че на повърхността се регистрират 0.4 ат.% паладий при свежата и при работилата проба. От разложения спектър на Pd_{3d} се наблюдават три окислителни състояния на паладия - Pd^0 , Pd^{2+} и Pd^{4+} .

➤ Съвместно с колеги от ИОХЦФ са изследвани серия от мезопорести катализатори на основата на оксиди на Ce и Fe, получени чрез хидротермален метод, с оглед установяване на връзка между фазовия състав, химичния състав на повърхността, текстурата и структурните характеристики на материалите и тяхното каталитично поведение в реакциите на разлагане на метанол и пълно окисление на етилацетат. Намерено е, че изследваните мезопорести материали могат да се разглеждат като високодефектна матрица от цериев оксид, в която се стабилизират изолирани Fe^{3+} йони и хематитоподобни структури. Тяхното съотношение може да бъде ефективно контролирано от съотношението Fe/Ce и/или условията на синтезиране (вид на разтворителя, утаяващия агент, метода на отстраняване на темплейта и температурата на калциниране).

Оксидни тънки слоеве и нанопрахове за фотокаталитични приложения

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

➤ Изследвано е влиянието на Nd и Sm върху структурата и свойствата на синтезирани по зол-гелен метод TiO_2 прахове. Доказано е, че Nd запазва смесената органично-неорганична аморфна структура при по-високи температури (400 °C), както и води до получаването на образци с по-малки размери на частиците в сравнение със самария. Получените прахове показват добри фотокаталитични и антибактериални свойства.

➤ С рентгенова фотоелектронна спектроскопия са изследвани слоеве от TiO_2 , дотирани с фосфор, използвани за фотокаталитична деградация на етилен и ацетилсалицилова киселина. Изследванията показват, че стойностите на атомното съотношение на пълния кислород към адсорбираните намаляват с увеличаване на количеството фосфор в прекурсорния разтвор до достигне на количество от 5 mol%, след което съотношението започва да нараства. Тези данни показват, че количеството адсорбиран кислород за пробата с 5 mol% фосфор е най-голямо, от което следва, че фотокаталитичната активност на тази проба би трябвало да бъде най-висока. С дифузноотражателен анализ е установена ширината на забранената зона на слоевете и е установено, че оптимална ширина за абсорбция във видимата област от спектъра е постигната за пробата с 5 mol% фосфор.

➤ Получени са нов тип корозионно устойчиви многослойни структури съставени от $\text{ZrO}_2/\text{TiO}_2$ / нисковъглеродна стомана. Съставът на разтвора за получаване на TiO_2 подслой се модифицира с два различни типа полимери (хидроксипропил целулоза и TWEEN 80). Структурите, съдържащи полимер-модифициран TiO_2 демонстрират по-висока корозионна стабилност в условия на външна поляризация в сравнение със структурите с немодифициран слой. Всички проби имат аморфна структура с относително плътна, хидрофобна повърхност.

➤ Постигната е висока корозионна устойчивост на галванизирани нисковъглеродна стомана, чрез нанасяне на хибридна структура от нов тип, съставена от слой хитозан (като подслой) и трислойно покритие от ZrO_2 . Подслой е нанесен, чрез потапяне на стоманената подложка в хитозан разтворен във винена киселина. Слойът е подложен на обработка при две температури: 25 °C и 180 °C и трикратно потапяне в разтвора на циркониев диоксид.

Сорбенти за пречистване на течности

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Материали и процеси за опазване на околната среда“.

➤ Синтезирани са два нови катионизирани целулозосъдържащи материали от растителни отпадъци (оризови люспи и люспи от лимец) чрез отстраняване на лигнина и хемицелулозата от тях и модифициране с кватернерна амониева сол -N, N-диметил октадециламин. Изследвани са адсорбционните свойства на получените сорбенти по отношение на анионното багрило конго червено. Определено е влиянието на основните параметри върху адсорбционния процес и са установени оптималните условия за провеждането му. Уравнението на Лангмюир и кинетичният модел на реакция от псевдо-втори порядък описват най-добре равновесните експериментални данни. Установено е, че механизъмът на адсорбция се дължи на комбинацията от електростатично привличане, водородни връзки и конкуренцията на OH^- йони. Изчислени са стойностите на термодинамичните параметри, които показват спонтанния и екзотермичен характер на процеса. Получените катионизирани целулозосъдържащи материали са подходящи за адсорбция на анионни багрила от води.

Адсорбенти за CO_2 и за съхранение и пречистване на съвременни горива

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

➤ Синтезирани са нови порести калиево-никелови хексацианофератни аналози на Пруско синьо, които представляват отлична платформа за улавяне на CO_2 . Установено е, че порьозността и изостеричната топлина на адсорбция на CO_2 могат да бъдат оптимизирани чрез промяна на атомното съотношение Ni:K в структурата и по този начин да бъде постигнато лесно, енергийно ефективно улавяне и освобождаване на CO_2 . Докладвано е първото ИЧ спектроскопско доказателство за висока структурна

чувствителност на материала спрямо промени в налягането на водните пари. Присъствието на водни пари, обаче почти не влияе на адсорбцията на CO₂.

➤ Сорбционните изотерми на водород върху Cu-ZSM-5 зеолити показаха, че количеството на активните адсорбционни Cu центрове зависи от съотношението Si/Al и степента на обмен. Посредством ИЧ спектроскопия на адсорбирани CO и NO бе наблюдавана мед едновременно в две степени на окисление. Същевременно кълстерните DFT изчисления предвидиха, че както моно-, така и двувалентните Cu йони могат да свържат H₂ с различна сила в зависимост от координационното обкръжение, определено от разпределението на Al в структурата на зеолита.

Инфрачервена спектроскопия на повърхностни съединения и механизми на каталитични реакции

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

➤ Публикувана бе обзорна статия в най-престижното химическо списание в света Chemical Reviews (IF = 60.622), в която критично се разглеждат научни публикации за приложението на Инфрачервена и Раман спектроскопии като мощни инструменти за първоначално характеризирани на MOF материали и за изучаване процесите на тяхното взаимодействие с различни газове. Разгледани са, както предимствата, така и ограниченията на двете техники, като са подчертани различни случаи, в които приложението на ИЧ или Раман спектроскопия е за предпочитане. Подчертават се и особеностите на взаимодействието на MOF материали със специфични газове и някои противоречиви отнасяния на ИЧ абсорбционни ивици.

➤ Структурите на повърхностни нитрати бяха ревизирани въз основа на изследвания, проведени с моделен оксид CeO₂ чрез ИЧ спектроскопия и DFT изчисления, подкрепени с изотопно маркиране. Ивиците на монодентатни нитрати, бяха реинтерпретирани като тридентатни нитрати в C_{2v} симетрия. Останалите ивици бяха отнесени към различни бидентатни нитрати, които едновременно свързват и хелатират металния катион и се различават по симетрия и геометрия на свързване. Предложен бе начин за експериментално разграничаване на различните структури, който се основава на разцепването на високочестотната ИЧ ивица при частичен обмен с ¹⁸O.

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

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Кристалохимия на композитни материали“

➤ Съвместно с колеги от ИФТТ-БАН бяха проведени изследвания върху получени чрез ALD-метод (atomic layer deposition) тънки филми от ZnO дотирани с Ni, Co и Fe. Тези материали имат потенциално приложение като сензори, запаметяващи и спинтронни устройства и др. С рентгенова дифракция бяха определени фазовия състав, размер на кристалити, параметри на елементарната клетка и текстурни характеристики на отложените филми. Изследванията потвърдиха включване на Ni, Co и Fe в структурата на ZnO и тяхното влияние върху начина на ориентация и растеж на кристалитите върху субстрата.

➤ В сътрудничество с колеги от ИЕ-БАН са изследвани различни наноструктури, получени чрез импулсно лазерно отлагане посредством наносекунден лазер във въздух при атмосферно налягане и прилагането на магнитно поле. Чрез тази технология са формирани наноструктури, изградени от наночастици с различна морфология, структура и ориентация. С XPS спектроскопия е определен е химичният състав на

различни серии образци, получени чрез едновременна аблация от две мишени (Fe и Ag, Fe и Zn, Fe и Ti, Fe₂O₃ и ZnO, Fe₂O₃ и TiO₂, Fe и TiO₂). Изследвано е влиянието на различните параметри на отлагане върху химичния състав на получените слоеве. Изследваните наноструктури могат да намерят приложение в проектирането на нови поляризационни, магнитооптични и сензорни устройства.

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 спектрометрия“.

➤ Изследвана е динамиката на преходните метали Al, Fe, Mn, Ni, Cu, Zn, Cd и Pb в системата *вода - почва – почвен разтвор – растителност* в три района *Сопот – Калофер - яз. Копринка, ТЕЦ Бобов дол и Челопеч – Църквище – Пирдоп* (в пълноводния период) чрез *in situ*, лабораторни изследвания и термодинамично моделиране.

1) Повърхностните води в районите са охарактеризирани чрез измерване на физикохимичните параметри (температура, рН, разтворен кислород и соленост) и определяне концентрациите на главните йони (Cl⁻, SO₄²⁻, K⁺, Ca²⁺ и Mg²⁺), нутриенти (PO₄³⁻, NO₂⁻, NO₃⁻ и NH₄⁺), преходни метали (Al, Fe, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Cd и Pb) и разтворен органичен въглерод. Изчислени са праговете индекси на замърсяване по елементи и общия индекс на замърсяване. Оценен е екологичния статус на водите. Установено е, че всички изследвани води са битово и селскостопанско замърсени. По отношение на преходни метали високи нива на замърсяване са установени за водите на язовир Копринка (Al, Mn, Ni, Zn, Cd и Pb), река Разметаница (Mn и Pb) в района на ТЕЦ Бобов дол и до флотационния завод на „Аурубис“ АД (Mn, Zn и Pb).

2) Почвите са охарактеризирани чрез определяне концентрациите на изследваните метали в екстракти, получени с три вида екстрагенти: (1) царска вода, за определяне псевдототалната концентрация; (2) 1M KCl, за определяне йонообменната мобилност, и (3) дестилирана вода, за определяне водоразтворимата мобилност на металните йони. Установено е, че в общия случай йонообменната мобилност е по-висока от водоразтворимата. Al и Fe показват най-ниски коефициенти на мобилност. Най-високи коефициенти на мобилност показват Mn и Cd, последвани на 1-2 порядъка по-ниско от Cu, Zn и Ni.

Получените данни за химичния състав на водите и на водните почвени екстракти са използвани за термодинамично моделиране на химичните форми на елементите чрез прилагане на Модел на йонна асоциация за изчисляване на неорганични форми, и Стокхолм Хюмик Модел за изчисляване на органичните химични форми.

Получени са данни за разпределението на химичните форми на преходните метали. Установено е, че Al и Mn съществуват главно под формата на неорганични форми, за Al са хидрокси комплекси, а при Mn – свободни Mn²⁺ йони и карбонатни комплекси; Fe, Cu и Pb съществуват като металоорганични комплексни форми; За Co, Ni, Zn и Cd са характерни и неорганични и металоорганични форми, чието съотношение варира в зависимост от условията на средата.

Прогнозирана е спонтанната кристализация и вида на кристализиращите соли във водите на районите *Сопот – Калофер - яз. Копринка* и *район Челопеч – Църквище – Пирдоп*. Изчислено е редуцирането в концентрацията на изследваните йони и влиянието, което това намаление оказва върху разпределението на химичните им

форми. Установено е, че в резултат на протичащи спонтанно утайтелни процеси при Al, Co, Ni, Zn и Cd, органо-металните комплекси нарастват за сметка на неорганичните форми. При Mn нарастват свободните йони за сметка на карбонатните комплекси.

3) Определени са концентрациите на изследваните преходни метали в листа и стъбла от ливадна некултивирана растителност - гребеновиден житняк (*Agropyron cristatum*), трева (*Gramineae*), див копър (*Foeniculum vulgare*), див джоджен (*Mentha pulegium*), детелина (*Trifolium*) и листа от дървесни видове - трепетлико-подобна топола (*Populus tremuloides*), бяла черница (*Morus alba*) и бяла върба (*Salix alba*) в район *Conom – Калофер – яз Копринка*. Установено е, че съдържанието на Cu навсякъде превишава средното съдържание, характерно за растителност. Pb не се открива, а Co и Cd се откриват единствено в листа на трепетлико подобна топола и гребеновидния житняк.

В района на *Челопеч – Църквище - Пурдон* са събрани образци само от обикновена трева (*Gramineae*), разположена на различно разстояние от водните басейни – в непосредствена близост или потопени във водата и на 5-10 м от водата. Не се открива присъствие на Cd, но Al, Fe, Cu и Zn са регистрирани във всички проби, като съдържанието на Fe, Cu и Zn превишава средните стойности за растение във всички изследвани проби. Наблюдават се три тенденции: (1) по-високи стойности на изследваните преходни метали в корените, отколкото в стъблата на тревата, независимо от разстоянието до водните басейни, от което тя е взета, и (2) по-високи стойности в стъблата на тревата, взета на отстояние от водните басейни в сравнение със стъблата в непосредствена близост до басейните, (3) по-високи стойности в корените на тревата, взета от непосредствена близост до басейните в сравнение с по-отдалечените.

Изчислените коефициенти на фитоаккумуляция показваха, че независимо от вида на изследваната растителност, разстоянието до водните басейни и дали преходните метали се натрупват в стъблата или корените, във всички зони най-високи коефициенти на фитоаккумуляция са изчислени за Cu и Zn, последвани от Mn и Ni. Al и Fe практически не се натрупват в растенията, което е логично като се има пред вид ниската им екстрахируемост.

Получените резултати за формите на съществуване на елементите във водите и водно почвените екстракти и коефициентите на фитоаккумуляция потвърждават направената хипотеза, че фитоаккумуляцията е комплексен процес, който зависи не само от съдържанието на елемента в почвата, но и от неговата мобилност, както и от формата под която съществува в почвения разтвор. Изследванията доказват, че органо-металните комплекси на преходните метали с фулво-киселините са предпоставка за тяхната акумулация от растенията.

Прогнозирана е инициирана кристализация чрез използване на четири типа мелиоранти с цел ремедиация на замърсени почви. Мелиорантите са определени на база анализ разтворимостта на съединенията на изследваните преходни метали. Като модел са използвани почвени разтвори от район Западни Родопи. Установено, е че от термодинамична гледна точка най-добри резултати се получават при третиране на почвите с CaCO₃ и съотношение мелиорант : $(Cd^{2+} + Cu^{2+} + Ni^{2+} + Pb^{2+} + Zn^{2+}) = 1:150$.

➤ Смес, включваща пиролизирани оризови люспи, пепел от слънчогледови люспи и люспи от най-древната пшеница, лимец (*Triticum monoccosum* L.) в теглово съотношение 1:1:1, има високо съдържание на усвоими и важни за растенията и почвата макро- и микроелементи. Заедно с добрите физико-химични показатели които притежава, тази смес от селскостопански отпадъци може да бъде използвана като екологична биотор в различни системи на земеделието и за подобряване на почвените показатели.

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

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“ и „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“.

- Продължава разработването на технологии за получаване на нови продукти на основата на черноморска луга и кал.
- Контролът на качеството на лечебните растения, използвани в традиционната медицина и фармацевцията, е важна стъпка за защита на потребителите от замърсяване и рискове за здравето. В листа на *Sempervivum tectorum* L са определени общото съдържание на елементи, а в бионалични фракции - есенциалните елементи като Са, Mg, Zn, Mn и Fe. Високите бионалични концентрации на основните елементи биха могли да обяснят широкото използване на това растение в народната медицина. Например, високото съдържание на Mg в пресния сок е отговорно за неговото противовъзпалително действие и приложение като средство за облекчаване на болката в ушите.
- Изследвани са физикохимичните свойства на масла, получени от черен кимион и кориандър. Профилът на мастните киселини и за двете масла показва, че преобладаващата съставка на маслото е линолова киселина (С 18:2) в 58.2 % и 42.29 %, имат високо съдържание на полиненаситени мастни киселини, γ - и α -токофероли. Ниските концентрации на Pb, As и Cd определят маслата като безопасни за употреба и подходящи съставки за фармацевтични, козметични и хранителни цели.

Аналитично охарактеризиране на растителни материали с приложение за биосорбенти;

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“ и „Материали и процеси за опазване на околната среда“

- Изследвана е адсорбцията на медни йони върху два биосорбента получени на базата на етерично-маслените растения *Anethum graveolens* L. и *Thymus vulgaris* L. Изследвана е текстурата и морфологията на повърхността им посредством нискотемпературна адсорбция на азот и SEM. Изучено е влиянието на основните параметри: количеството биосорбент, киселинността на средата, времето на контакт, изходната концентрация на медните йони и температурата с цел да се определят оптималните параметри на адсорбционния процес. Експерименталните данни от инфрачервена и рентгенова фотоелектронна спектроскопия показват участие на хидроксилни групи от фенолните и карбоксилните структури, както и на естерни и етерни групи в задържането на металните йони на повърхността на биосорбентите. Адсорбционният процес е сложен и включва реакции на комплексообразуване, йонен обмен и електростатично привличане. 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.

Фитоизвличане на полезни компоненти от обекти на околната среда – почви, води и др.

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“.

➤ Методът за количествено извличане на рений с вода от изсушена растителност, обогатена с рений при лабораторни условия е тестван върху растителни проби от районите на рудниците Асарел и Медет. Изследвани са проби от акация, бяла детелина, трева и др., събирани от различни места и през различни сезони на годината. Установено е, че във всички случаи при наkisване и бавно разбъркване на 1 г изсушена растителна маса за 30 мин в 30 мл дестилирана вода се извлича над 99 % от съдържащия се в пробите рений. Това доказва, че реният се натрупва във вакуолите на листните клетки под формата на водоразтворим перренат в растенията независимо от това дали са отглеждани върху почви дотирани с калиев перренат или са расли в „реални“ условия.

➤ Проведена е серия от експерименти за оптимизиране на процедурата за извличане на рений от цементационен меден концентрат, получен чрез бактериално окисление на бедни на мед руди. Процедурата се базира на предварителна термична обработка на концентрата, при която цялото количество рений преминава във водоразтворима перренатна форма, с последващо извличане на рения чрез наkisване на концентрата във вода. Оптимизирано е времето и температурния интервал за нагриване, количеството на водата, необходима за извличане на рения, както и времето на наkisване с и без разбъркване. Установено е, че при нагриване на 1 г концентрат при $T = 300^{\circ}\text{C}$ в течение на 1 час, последващото му наkisване в 5 мл вода с разбъркване за 1 час и престой без разбъркване за 1 нощ се извличат 99.7 % Re. Предстои прецизиране на параметрите по извличането на рений от по-големи количества проби, както и експерименти за получаване на амониев перренат от водните извлеци.

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 .

➤ Съвместно с колеги от ИП-БАН бяха изследвани комплексобразуващите свойства на влакнести материали на основата на поливинилов алкохол/хитозан, съдържащи моделното лекарство 8-хидроксихинолин-5-сулфонова киселина, с Cu^{2+} и Fe^{3+} йони посредством ЕПР. Получените резултати за координацията на Cu^{2+} и Fe^{3+} помогнаха за вникване в антибактериалните и противогъбични свойства на тези композити.

➤ Посредством ИЧ спектроскопия е установено, че биосорбционният процес на медни йони върху копър протича чрез участието на фенолни, алкохолни, етерни и естерни групи.

➤ Изследвано е влиянието на фосфатни покрития, получени в лаб. „Електрохимия и корозия“ от ИФ върху корозионната резистентност на алуминиева сплав – Al 1050. Чрез XPS е изследван качествения и количествен състав на защитните фосфатни слоеве. Идентифицирани са всички съединения на повърхността на третираните образци. Установено е, че фосфатните групи покриват плътно повърхността на образците и играят съществена роля за корозионната защита на алуминиевите сплави.

- Чрез XPS е изследван химичният състав на електрохимично отложени върху алуминиева сплав (Al 1050) слоеве от Cu, Ni и Cu/Ni – за приложение като защита от корозия. Установено е, че на повърхността никеловите йони са отложени главно под формата на $\beta\text{-Ni}^{3+}\text{OOH}$ и $\beta\text{-Ni}^{2+}\text{OOH}$ в съотношение 34 % : 44 %. Медните йони са отложени главно под формата на Cu^0 и Cu^+ , което служи като доказателство за наличието на редокси-двойка между медните йони, окисляващи присъстващия в електрохимичната система никел. Изследването е в сътрудничество с колеги от ХТМУ - София.
- Чрез Рентгенова фотоелектронна спектроскопия е доказано наличието на цинков оксид, с минимални количества от хидроксиди и/или карбонати на цинка, под формата на $\text{Zn}_5(\text{OH})_6(\text{CO}_3)_2$, получени в резултат на анодното поведение на цинковите образци във водни разтвори на натриева основа. В резултат на съвместното изследване с колеги от ХТМУ - София е установено, че тези съединения оказват съществено влияние върху кинетиката на галваностатична анодна поляризация на цинк в натриева основа.
- В съвместни изследвания с колеги от ИФХ бе установено, че включването на частици от PANI-SiO₂ в матрицата на цинково покритие подобрява корозионната устойчивост на нисковъглеродната стомана в 5% разтвор на NaCl в сравнение с чисто цинково покритие. Чрез Рентгенова фотоелектронна спектроскопия бе определен химичният състав на повърхността на различните хибридни покрития преди и след третирането им в моделната корозионна среда. Доказано е формирането на чисто цинково покритие и хибридно цинково покритие с частици от PANI-SiO₂. Проследени са промените, дължащи се на престой на изследваните образци в корозионна среда.
- Получени са плътни, силно текстурирани, хидрофобни ZrO₂-TiO₂ (1:1) покрития върху стомана по метода на зол-гел чрез използване на различни органични и неорганични циркониеви прекурсори при различни температури. Установено е, че степента на влияние на прекурсора е различна в зависимост от температурата на обработка (Ttr). XPS анализът показва, че атомното отношение TiO₂:ZrO₂ е 1:1 при филмите, получени от Zr(OBu)₄, докато при филмите, получени от ZrO₈Cl₂ отношението е $\approx 2:1$. Количеството на титана и циркония на повърхността се увеличава с повишаване на температурата на обработка на филмите. Изследвана е защитната способност на слоевете в избрана моделна корозионна среда с хлоридни йони като активатори на корозия. Установено е, че аморфната плътна и гладка структура, хидрофобността и ниското съдържание на хидроксилни групи в комплекса са отговорни за повишените антикорозионни свойства на композитните филми.
- Чрез Рентгенова фотоелектронна спектроскопия са изследвани синтезирани графеноподобни фази чрез лазерна аблация на микрокристален графит във водна суспензия. Регистрираните пикове показваха наличието на C-O/C-OH, C-O-C и C=O групи на повърхността на изследваните проби и образуването на C₆₀ и въглеродни нанотръби (CNT).
- Чрез Рентгенова фотоелектронна спектроскопия е изследвано влиянието на UV-C облъчването върху структурата на графеноподобни, хидрогенирани аморфни (aC:H), хидрогенирани тетраедрични аморфни въглеродни (ta-C:H) и аморфни въглеродни тънки филми. Облъчването на наноразмерни графенови филми намалява или дори елиминира -COOH/-C = O връзките от повърхността на филмите, докато количеството -COH/-COС се увеличава. Облъчването на a-C:H филмите (за перпендикулярна ориентация) води до намаляване на количеството на съдържащите кислород радикали до 50%.

Моделиране на структури, спектроскопски свойства, адсорбционни процеси и реакционни механизми

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

➤ В сътрудничество с учени от ФХФ-СУ е изследван механизма на антена-ефекта за $Tb(phen)_2(NO_3)_3$ комплекс с висок квантов луминесцентен добив и е показано, че фенантролина е подходящ антена-хромофор, който поглъщайки лъчение при ~ 350 nm, предизвиква зелено излъчване от $Tb(III)$ на комплекса. Квантовохимични изчисления предсказаха енергетичната диаграма и характера на възбудените състояния, скоростните константи на конкурентните процеси на енергиен пренос и релаксация, и най-вероятния път ($S_0 \rightarrow S_1 \rightarrow T_2 \rightarrow T_1 \rightarrow {}^5D_4$) за ефективен енергиен пренос $phen \rightarrow Tb^{3+}$. Високият квантов добив от 13%, бе обяснен с по-голямата скорост на енергиен пренос в сравнение с тази на излъчвателната и безизлъчвателната релаксация от заселеното триплетно състояние.

➤ Съвместно с колеги от ИМК-БАН са изследвани кристалната и молекулна структура на новополучени комплекси на магнезиев йодид с 2, 4 и 6 молекули урея. Квантовохимичните изчисления на енергията на образуване на комплексите по реакционна схема предсказаха по-голяма термодинамична стабилност с нарастване на броя на молекулите урея в комплексите, благодарение и на образуването на вътрешномолекулни водородни връзки. Изчислените ИЧ спектри показаха, че по отместването на $C=O$ вибрационната ивица може да се съди за образуването и силата на връзката $Mg - O_U$.

➤ Изследвана е локализацията на клъстери на халкогениди в порите на клиноптилолит и адсорбция на неорганични молекули (NO , N_2O , N_2/O_2) с методите ONIOM(DFT/MM). Клъстерите на желязо и кобалт, координирани със сулфидни и карбонилни групи са стабилни в кухините А и В на клиноптилолит и адсорбират обратимо NO и N_2O . За сравнение, при алкални и алкалоземни катиони, адсорбционната енергия е два до три пъти по-висока и процесът на десорбция изисква много по-висока енергия. Оптималният размер на клъстерите е определен, като 4-атомни центрове, характеризиращи се с висока стабилност и добри адсорбционни характеристики. Координация на халогенидни и карбонилни лиганди стабилизира определени клъстерни конфигурации, а именно кубични, но оказва незначително влияние върху адсорбционните свойства. За да бъдат ефективни за адсорбция и на азот, изследвани са и смесени клъстери с участие на преходни и алкални катиони.

➤ Проведени са изследвания върху желязо-сулфидни и желязо-селенидни клъстери, оценена е тяхната стабилност при координиране с халогенидни и карбонилни лиганди, както и активността им като катализатори за редукция на CO_2 до CO или $HCOOH$. При заместване на желязо с кобалт, селенидите показват по-ниски енергии на фотохимична активация за първия етап на едноелектронна редукция на CO_2 . При оптимизиране на състав и структура, тези съединения имат потенциал на фотокатализатори за превръщане на CO_2 в продукти на частично хидрогениране.

➤ Експериментално е показано, че при нагряване на формамид във вакуумни условия, без наличие на какъвто и да е минерален катализатор, се получават нуклеинови бази, птерин и аминокиселини. На базата на неемпирични квантовохимични изчисления е предложен пълен реакционен път и механизми на самокатализирани пребиотични реакции, показващи как само от формамид могат да се получат различни прекурсори и едновременно образуване на основни пуринови

(аденин, хипоксантин, гуанин, изогуанин, ксантин) бази и птерини. Дадено е обяснение за пребиотично образуване на кофактори, към които спада и птерина, и които са от съществено значение за многоензимно катализирани реакции. Птеринът до сега е считан за „молекулен фосил“, т.е. съединение, получено по-късно, при вече функционираща биохимия.

➤ Посредством флуоресцентни и неемпирични квантово-химични методи е изследвано свързването на тавтомерите на 2-карбамидо-1,3-индандион (CAID) към нуклеотиди и е установено е, че съединението се свързва с нуклеинови киселини чрез водородни връзки към фосфатната група, а не се интеркалира. CAID е предложен като нов надежден тип флуоресцентен биомаркер. Разгледано е и влиянието на ориентирано външно електрично поле върху тавтомерията и структурните характеристики на съединението, тъй като в биологичната среда молекулите могат да бъдат изложени на силни локални електрични полета. Установено, че електричното поле оказва силно влияние върху тавтомерното равновесие в CAID и при определени интензивности на полето равновесието се променя.

Инструментални методи за анализ на археологични артефакти

Темата се изпълнява от учени от „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“.

➤ Прозоречно стъкло от раннохристиянска базилика, датирана в периода IV-VI в. и разкрита до с. Нова Махала, обл. Батак, е използвано като вътрешнолабораторен стандарт при разработване на директен ETV-ICP-OES (Електротермично изпарение, съчетано с атомноемисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма) метод за едновременното определяне на 27 главни, второстепенни и следови елементи в кандидат за сертифициран сравнителен материал CRM BAM-S005c (натриево стъкло), както и за участие в междулабораторни сравнения при сертификационната процедура. Изследването е проведено съвместно с колеги от Германия от Техническият университет Фрайберг и от Федералния институт за изследване на материалите, Берлин. Оптимизираната време/температурна програма и използването на газ-модификатор CHF₃ обезпечават получаването на точни и възпроизводими резултати с относително стандартно отклонение в повечето случаи < 5% RSD. Метрологичните характеристики на разработения метод са сравними и в някои отношения превъзхождат тези на конвенционалното (след разлагане на пробата) ICP OES определяне.

Елементен анализ на проби с разнообразен матричен състав с помощта на “зелени” аналитични методи.

Темата се изпълнява от учени от „Методична лаборатория по атомна спектрометрия“.

➤ Определено е съдържанието на Ca, Mg, Fe, Zn, Cu, Mn, Co, Ni, Cr, Pb и Cd в проби от червени (Cabernet Fran, Rubin, Syrah, Merlot) и бели (Dimiat, Sauvignon Blanc и Chardonnay) вина от района на Тракийската низина, както и в две плодови вина (от пъпеш и бяла череша в комбинация с Chardonnay) във връзка с оценка на качеството на вината, тяхната екологична чистота и безопасност за консумация. Във всички проби съдържанието на токсичните елементи (Cd < 0.01 mg kg⁻¹ и Pb < 0.17 mg kg⁻¹) е под допустимите норми и регулируемите есенциални елементи като Zn, Cu, Mn, Fe и др. отговарят на нормативните изисквания на Европейското законодателство. Съдържанието на определяемите елементи в различните видове вина варира в широки граници, поради разнообразните сортове грозде и плодове. Може да се отбележи, че концентрациите на изследваните елементи в плодовите вина са по-високи в сравнение с тези в гроздовите вина.

2.1. Най-значимо научно постижение в ИОНХ

Вибрационната спектроскопия като мощен инструмент за изучаване на Метал-органичните структури (МОС) и на тяхното взаимодействие с различни газови молекули



Метал-органичните структури (МОС) са сравнително нов клас материали с потенциал за приложение в разнообразни области. Колектив от български учени от Института по обща и неорганична химия на Българската академия на науките публикува обзорна статия в най-престижното химическо списание в света *Chemical Reviews*. В статията е разгледано критично приложението на вибрационната спектроскопия като мощен инструмент за изучаване на МОС и на тяхното взаимодействие с различни газови молекули - молекули-сонди и целеви молекули. Молекулите-сонди се използват за детайлно характеризиране на материалите, докато целевите молекули имат отношение към зелената химия, т.е. към опазване на околната среда (съхранение на водород, сепариране на CO_2). Обсъдени са както предимствата, така и ограниченията на различните разновидности на вибрационната спектроскопия и са разгледани особеностите на взаимодействието на МОС със специфични газове.

Статията е резултат от провежданите авангардни висококачествени научни изследвания на колектива и е изработена в рамките на Националната научна програма “Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита – ЕПЛЮС”, финансирана от Министерството на образованието и науката.

Ръководител: акад. дхн Константин Хаджииванов

Обзорна статия:

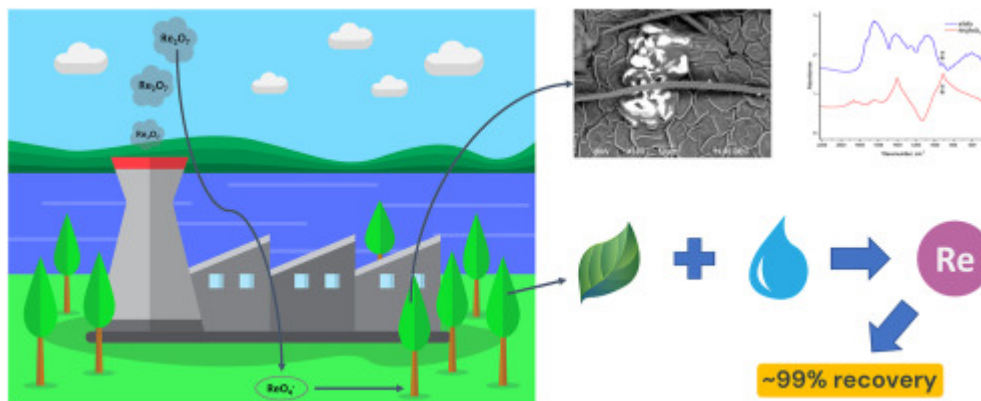
Konstantin I. Hadjiivanov, Dimitar A. Panayotov, Mihail Y. Mihaylov, Elena Z. Ivanova, Kristina K. Chakarova, Stanislava M. Andonova, and Nikola L. Drenchev, “Power of Infrared and Raman Spectroscopies to Characterize Metal-Organic Frameworks and Investigate Their Interaction with Guest Molecules”, *Chem. Rev.* 2021, 121, 3, 1286–1424. (IF = 60.622 за 2020 г.).

Статията е с отворен достъп на следния адрес:

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.chemrev.0c00487>.

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение в ИОНХ

Механизъм на натрупване на рений в растителност и метод за неговото извличане от растителната маса



Пътят на рения: от производствените емисии, през почвата, вакуолите на листните клетки на растения до водните извлеци на изсушената растителност.

В резултат на дългогодишни експериментални проучвания върху натрупването на рений в растителност е изяснен механизмът на акумулиране на метала в растенията. Изследванията с помощта на сканиращата електронна микроскопия и Инфраредна спектроскопия доказаха, че реният се натрупва под формата на водоразтворим калиев перренат във вакуолите на листните клетки на люцерна, отглеждана върху дотирана с метала почва. На базата на този факт е разработен прост и екологично чист метод за неговото извличане от растителната тъкан чрез краткотрайно на кисване на изсушения фитоконцентрат във вода. От водните извлеци лесно може да се получи търговския продукт на рения- амониев перренат. Методът е тестван върху растителни проби, събирани от района на мините Асарел и Медет и е доказана неговата ефективност. Основната сфера на приложение на предложения метод е рениевия фитодобив.

Ръководител: гл. ас. д-р Христина Цветкова

Научна публикация:

Christina Tzvetkova, Luís A.B. Novo, Stela Atanasova-Vladimirova, Tsvetan Vassilev, "On the uptake of rhenium by plants: Accumulation and recovery from plant tissue", Journal of Cleaner production, 328 (2021), 129534 (Q1, IF: 9.297) ISSN: 0959-6526

<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.129534>

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ИОНХ

В рамките на проекта “Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии” (TwinTeam), през 2021 г. ИОНХ задълбочи сътрудничеството си 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 рамките на това сътрудничество бяха проведени работни срещи, и организиран научен форум SizeMat3, което даде началото на съвместни изследвания.

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 при публикуване на резултати в сътрудничество с чуждестранни учени.

През 2021 г. ИОНХ е водеща организация на проект по двустранна спогодба на ФНИ с КНР (Университета по технологии, Департамент по инженерна механика в гр. Далян).

Учени от ИОНХ продължават изпълнението на дългогодишни междуакадемични договори и споразумения с Университет "Бар Илан", Рамат Ган, Израел по тема „Катодни материали с високо съдържание на никел $\text{LiNi}_x\text{Co}_y\text{Mn}_x\text{O}_2$ ($x \geq 85$ at.%) за усъвършенствани литиево-йонни батерии: синтез на недотирани и катионно-легирани материали, структурни, повърхностни и електрохимични изследвания“ и с Институт по химия, технология и металургия, Център по Катализ и химично инженерство Сръбската академия на науките и изкуствата, Сърбия на тема „Моно- и поли-компонентни каталитични системи за пречистване на води и въздух онечистени с моделни замърсители“. Един учен от ИОНХ има лично участие в проект на Руския научен фонд.

Международното сътрудничество на учените от ИОНХ на институтско ниво е и под формата на неформални контакти за съвместни изследвания с колеги от чуждестранни научни институции: Университет "Св. св. Кирил и Методий" (Скопие, Македония), Университет в град Кордоба (Кордоба, Испания), St. Petersburg State University, Университет в Атина, Университет в Прага, Чешката академия на науките и др. В резултат на международното сътрудничество, което ИОНХ поддържа, 31 % от научните публикации са 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. В началото на 2021 г., ИОНХ получи резултатите от НАОА и акредитация на петте докторски програми за следващите 6 години. В центъра за обучение на БАН, учени от ИОНХ предлагат 7 специализирани курса (до 2026 г.).

През 2021 г., **двама докторанти** на задочна (1) и самостоятелна (1) форма на обучение успешно защитиха дисертационния си труд по докторска програма „Неорганична химия“ и „Теоретична химия“. Дисертационните трудове са със следните теми „Синтез и охарактеризиране на перовскитоподобни оксиди с приложение като катализатори за обезвреждане на метан“ (Силвия Станчовска) и "Механизми на пребиотични реакции на основата на формамид - ab initio моделиране" (София Славова). С изключение на защитилите, в ИОНХ са обучавани още **двама** докторанти на самостоятелна форма на подготовка по следните специалности от професионално

направление „Химически науки“: неорганична химия (1) и теоретична химия (1). Трима отчислени докторанти са в подготовка на защита на дисертационен труд. Хабилитирани учени от Института са съ ръководители на 6 докторантури в други научни организации - ИЕЕС-БАН, ИЕ-БАН, ФХФ-СУ и ХТМУ.

ИОНХ продължи през 2021 г. да осигурява добри условия за развитие на научния потенциал на младите учени. От 11 докторанта, защитили дисертации в периода 2016-2021 г., девет от тях продължават научната си кариера в ИОНХ, усъвършенстват работа си със специализирана апаратура, участват активно в научни проекти на Института.

Пет млади учени от ИОНХ се включиха с проекти в Националната програма „Млади учени и постдокторанти“ към МОН като 4-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. Един млад учен от ИОНХ спечели проект по Конкурс за финансиране на Фундаментални научни изследвания на млади учени и постдокторанти към ФНИ. Четирима млади специалисти са назначени на работа по проекти Вихрен и TwinTeam. Една студентка, Изабел Тренчев, от Факултет по изкуство и наука „Кригер“ към Университета „Джонс Хопкинс“, гр. Балтимор, щата Мериленд, САЩ е провела стаж (за 10 дни) в ИОНХ, по специално в Лабораторията «Електронна спектроскопия за твърди повърхности. В рамките на престоя ѝ, тя е запозната с дейността и научните изследвания, които се провеждат в института.

За поредна година обявен конкурс за прием на редовни докторанти пропада поради неявяване на кандидати. Това е тревожен факт и въпреки допълнителните финансови средства за докторантите в БАН, явно докторантското обучение е финансово и кариерно неатрактивно за младите висшисти. ИОНХ е регистрирана организация за обучение на студенти по проекта „Студентски практики“ и с оглед на подобряване на епидемичната обстановка в бъдеще, тази програма ще даде възможност на ИОНХ да обучава студенти.

През 2021 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“. Като член на жури в осмата ученическа научна сесия на Ученическият институт на БАН, секция „Биология, биомедицина, биоразнообразие и физикохимия“ участва проф. д-р Радостина Стоянова.

През 2021 г. ИОНХ организира в Поморие хибридна международна научна конференция SizeMat3, (присъствено и онлайн), която даде форум на над 80 участника от страната и чужбина, предимно млади учени да представят научните си резултати с докладвания и постери. Научният форум бе проведен в рамките на проекта TwinTeam. Подготвена бе интернет страница <http://twinteam.igic.bas.bg/sizemat/> за информация и онлайн регистрация, изготвен бе Book of Abstracts и мероприятиято бе отразено в мас-медиите.

Учени от ИОНХ са участвали в комисия на докторантски изпит по специалността (1 учен) и в изпитни комисии по конкурс за академична длъжност „главен асистент“ (3-ма учени). През годината успешно се проведеха два конкурса за академичната длъжност „професор“, три – за „доцент“ и два - за „главен асистент“, което е показател за активната работа на учените и тяхното реализирано кариерно израстване.

За поредна година е проведен четиридневен семинар (с. Рибарица, община Тетевен) за обучение на членовете на лабораторията «Солеви системи и природни ресурси» от София и Бургас (производствена база), финансиран от Вътрешен договор партияда „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;

➤ Проведени са експериментални изследвания върху индустриални катализатори за работа в системи за опазване на околната среда, производство на фирмата Халдор Топсо (Дания). Разработват се математични модели, описващи кинетиката на реакцията на пълно окисление на летливи органични съединения в отпадни газове в присъствие на серен диоксид и водни пари.

➤ Традиционно продължава разработването на иновативни продукти и технологии в Лаборатория "СОЛЕВИ СИСТЕМИ И ПРИРОДНИ РЕСУРСИ" (ССПР)- София и - Бургас при ИОНХ – БАН на основата на морски води и луги, и възобновяеми селскостопански отпадъци, организиране на малки производства на медицинска натурална козметика по поръчка на бизнеса. Лабораторията 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. 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. Извършва се тестване и пилотни изследвания на технологии за химически продукти и реактиви и за козметични и фармацевтични продукти, организиране на малки производства и проучване на пазара. С всяка изминала година разработките на Лабораторията се увеличават по асортимент и обем, и през 2021 г. ССПР-Бургас разработи и внедри **1 нов козметичен продукт**. Нарастват продажбите в страната и чужбина и през 2021 г. е сключен 1 нов договор с партньор от Англия за продукти с марката Black Sea Stars.

➤ През 2021 г. се поддържат 6 действащи патента, 3 търговски марки и 3 полезни модела (от тях ИОНХ е притежател на два патента и един полезен модел). Две изобретения със заявител ИОНХ-БАН са в експертиза.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

6.1. Стопанската дейност на ИОНХ през 2021 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* и *Solihug*. 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; "КРЕМ КОМФОРТ" ООД, "НЮ ГРИЙНЪРИ" ЕООД, "БЕЛАНН" ЕООД, "БИОНТРА" ЕООД; "ЛУГЕСТИКА" ЕООД, "КОНТЕСА БГ" ЕООД, "Козметикс България Профешънъл" ЕООД, "ВИДЕНОВИ КО" ООД, "АГЕНЦИЯ БИК" ЕАД, ФОР ПАВЕЛКО О.О. – Украйна, SIA "АНИЈА" – Латвия, Vengard UK Ltd – Англия. Многобройни спа-центрове в страната ползват произведените от ССПР-Бургас продукти с черноморска луга. Продължава производството на продукти поръчани от

фирми от страната и от чужбина, като през годината е реализирана продажба на обща стойност **646 625** 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 20 000 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 **99 985** 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 **56 481** лв. Основни клиенти са институти на БАН, НИС-СУ, ХТМУ, а от бизнес сектора - Сенсата Технолоджи ЕООД, Алианц България ЕАД, Зеолин ЕООД, Мелексис ЕООД, Сика България ЕООД, Октопод инвест холдинг ЕАД, МЦ Уроелит. ИОНХ има сключен договор с Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас за провеждане на анализи (на стойност около 20 000 лв.).

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 2021 г. приходите на ИОНХ се формират от:

- бюджетна субсидия **2 692 357**
(за работна заплата – 1 572 790 лв., 58.4 %)

Трансфери от ФНИ **266 575**
Трансфери от системата на МОН: **1 179 929**

Разлика между получени и предоставени средства **375 809**

Получени **420 041**

От БАН-Администрация 185 297

от ИФХ-БАН – 91 260

от ИЕЕС-БАН 92 300

от ИК-БАН- 6 135

от ИКИТ БАН 17 449

от ИФТТ БАН 27 600

Предоставени: **44 232**

на ИМК-БАН- 9 000

ИОМТ БАН 20 000

ИЕ БАН 13 432

ИЯИЯЕ БАН 1 800

Собствени приходи **803 811**

- приходи от продажба на продукция (без ДДС) 646 625

- приходи от извършени анализи 56 481

- договори с чуждестранни фирми (Халдор Топсо-Дания) 99 985

- Елиди 2008“ ЕООД 720

ИОНХ е получил през 2021 бюджетна субсидия в размер на **2 692 357** лв, като 58 % от нея са за заплати (1 572 790 лв). ИОНХ има привлечени средства в размер на **2 626 124**

лв. или съотношението на собствените средства към тези на бюджетната субсидия за 2021 г. е **49.4 % към 50.6 %** .Общо бюджетната субсидия и собствени приходи формират бюджет от **5 318 481**лв.

По бюджетна субсидия, средната месечна брутна работна заплата за 2021 г. е 1395 лв. при планова за годината 1049 лв. За сравнение, тя е по-висока от миналогодишната (средна месечна 1118 лв., планова 1028 лв.) с 25 %. Благодарение на участието в мащабни проекти стана възможно през 2021 г. да бъдат изплащани и допълнителни трудови възнаграждения – 584 238 лв., които са 37.1 % от годишния Фонд работна заплата (с което брутната работна заплата възлиза ~ 1 900 лв.). За сравнение, средната брутна работна заплата за третото тримесечие в общественния сектор за страната е 1605 лв., сектор образование - 1625 лв., за София-столица е 2068 лв. според Националния статистически институт, т.е. средствата за заплащане на труда на персонала в ИОНХ (бюджетно и допълнително) за 2021 г. доближават тези за София.

Плановата численост на ИОНХ-БАН към 31.12.2021 е 125 щатни бройки като реално заети са 115.

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. ИОНХ поддържа интернет страница <http://www.igic.bas.bg/> и facebook страница <https://www.facebook.com/IGIC.BAS.BG> .

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 (последно актуализиран с Протокол № 47/2019 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 2021 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
ИПАЗР	ИНСТИТУТ ПО ПОЧВОЗНАНИЕ, АГРОТЕХНОЛОГИИ И ЗАЩИТА НА РАСТЕНИЯТА "НИКОЛА ПУШКАРОВ
ГИ	Геологически институт
ИБЕИ	Институт по биоразнообразие и екосистемни изследвания
ИОМТ	Институтът по оптически материали и технологии
ИКИТ	Институт за космически изследвания и технологии
ИЕМПАМ	Институт по експериментална морфология, патология и антропология с музей



Трети международен семинар „Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (SizeMat3), 12-15 септември 2021 г. в Поморие. Научният форум бе организиран от Институт по обща и неорганична химия - БАН и се проведе в рамките на проекта „Европейска научна мрежа върху материали за чисти технологии“ (TwinTeam).