



ОТЧЕТЕН ДОКЛАД
на **ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ**
за **2022 г.**

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

януари 2023 г.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ИОНХ

1.1. Преглед на изпълнението на целите на ИОНХ

Дейностите в ИОНХ през 2022 г. са свързани с постигането на специфичните цели и задачи в 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 и работи по утвърдените научни тематика на Института свързани с енергийната ефективност, оползотворяването на природни ресурси и опазване на околната среда. През 2022 г. ИОНХ продължи да развива партньорската 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)** по Националната програма „Европейски научни мрежи“.

През 2022 г., ИОНХ продължи да изгражда двата 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 утвърдени приоритетни тематика: материали и тънки филми за опазване на околната среда; материали за съхранение на чиста енергия, керамика, биокерамика и стъкла за по-добър живот. Научните изследвания през 2022 г. се провеждаха в изпълнение на **четири национални научни програми**, целево финансирани от държавата насочени в полза на обществото: (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 2022 г. са в изпълнение на **37 проекта** на Института и **14 проекта** с лично участие на учени от ИОНХ. В съответствие с 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 научната работа са отразени в **116 научни публикации**, от които **113** са в индексирани издания в международна база данни **SCOPUS** и **Web of Science**. Научните изследвания са представени на **35 научни форума**, от тях 22 са международни и 13 са национални под формата на **106 представяния**. Върху научните трудове на учени от ИОНХ през 2022 г. са забелязани около **3265 цитирания**, което е показател за високо научно ниво на публикуваните изследвания. Благодарение на успеха на семинара SizeMat3-2021, през 2022 г. бяха публикувани **18 статии**, включващи материали от конференцията в специално издание **„Third Workshop on Size-Dependent Effect in Materials for Environmental Protection and Energy Application (SizeMat3)“** на реферираното научно списание **“Materials Today: Proceedings”** том 61, част 4, на издателството Elsevier, <https://www.sciencedirect.com/journal/materials-today-proceedings/vol/61/part/P4>. Трина учени от Института бяха гост-редактори на специалното издание.

ИОНХ е организатор на Международна научна конференция по методи и материали за чисти технологии (MetMat2022) в гр. Сандански, в рамките на проекта TwinTeam: над **80** български и чуждестранни участници, представени 8 пленарни лекции, 2 фирмени презентации и 48 доклада, хибридна форма (присъствено и онлайн). Създадена е интернет страница <https://twinteam.igic.bas.bg/metmat/> за информация и онлайн регистрация; абстрактите са публикувани в **Book of Abstracts**

<http://twinteam.igic.bas.bg/wp-content/uploads/2022/01/Book-of-abstracts-MetMat2022.pdf>; мероприятияето е отразено в мас-медията.

ИОНХ следва политика за привличането на млади специалисти, поддържане на висока квалификация на учените, осигуряване на кариерно развитие на квалифицирани учени, балансирано разпределение на учените по пол и научни области, осигуряване на съвременна научна инфраструктура и критична маса от учени за решаване на важни за обществото проблеми, в изпълнение на заложените мерки в НСРНИ в РБ 2017-2030. Успешно са проведени: един конкурс за професор, три – за главен асистент и един за асистент. Един задочен докторант по докторска програма „Аналитична химия“ е защитил успешно дисертационния си труд в ИОНХ. Постъпили на работа са 6 млади изследователи и други 8 работят по два проекта „Вихрен“ в ИОНХ. Благодарение на високите научни постижения, учени от ИОНХ – академик дхн Константин Хаджииванов (Физикохимия), проф. д-р Радостина Стоянова (Енергия), проф. д-р Екатерина Жечева (Енергия), както и проф. дхн Павел Пешев (Материали) и асоцииран учен д-р Михаил Атанасов (Неорганична и ядрена химия) са сред първите 2% от милиони учени по света в съответните тематични области в класацията на Станфордския университет за 2022 г. Ас. Нина Стоянова-Нанкова от ИОНХ е носител на наградата за най-млад учен „Иван Евстратиев Гешов“ за 2021 г. (връчена 2022 г.).

Благодарение на активното проектно и програмно финансиране продължи обновяването на материално-техническата база на Института, включващо лабораториите (напр. Лаб. 113) и апаратурите. Новозакупени за ИОНХ са: многоканален потенциостат/галаностат оборудван с импедансметър на фирма "Biologic"; едноканална система за електрохимични изследвания "Autolab"; автоматичен филм апликатор "Proseq", окомплектован с вакуум-помпа; лабораторни инкубатори/термостати "Binder"; планетарен центробежен миксер "Thinky"; пламъчно-йонизационен газов анализатор за непрекъснат контрол на общо съдържание на въглеродороди в газова фаза, XPS ESCALAB II – SIMSLAB (дарение) и др. През 2022 г. са постигнати устойчиви резултати, които утвърждават 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“, ИОНХ изгражда устойчиви научни мрежи и мрежи за обучение с чуждестранни научноизследователски организации в рамките на **Национална програма „Европейски научни мрежи“** с проект „Европейска мрежа върху химия на материали за чисти технологии“ (TwinTeam). Дейностите по проекта се изпълняват съвместно 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 към центъра на Испанския съвет за научни изследвания и Университета на гр. Севиля, Испания, което допринася за повишаване на научно-изследователския и технологичен потенциал на учените в ИОНХ и за привличане на 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 – 2023 г. по ОП-НОИР (пета 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 (четвърта година) като партньор.

➤ **Два научни инфраструктурни проекта** по национална пътна карта (партньор): ИНФРАМАТ (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-ЕССSEL (2018-2023) „Съхранение на енергия и водородна енергетика“ за обновяване, разширяване и поддържане на научната апаратура в ИОНХ.

➤ **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**“- 1 проект на ИОНХ.

5. ИОНХ се включи в Националната програма „Стимулиране на публикационната активност в авторитетни международни научни списания и отворения достъп до научна информация“, бенефициент БАН.

➤ В ИОНХ се изпълняват два проекта по **Националната научна програма „Върхови изследвания и хора за развитие на Европейската наука“ (Вихрен)** към (ФНИ), модул „Водещ учен“ за провеждане на върхови научни изследвания и ускоряване на реинтеграцията и кариерното развитие на учени в българските висши училища и научни организации. Проекти: 1) „Синергизъм между катионни и анионни редокс реакции при материали с колосален интеркалационен капацитет“ (CARiM), ръководител проф. д-р Радостина Стоянова, в Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и 2) „Advanced Isotopic Labelling for Identification of ABn Surface Structure“ (Adonis), ръководител акад. Константин Хаджииванов в Лаборатория „Реактивност на твърди повърхности“.

➤ Изпълнение на **19 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**. **8** учени са включени с лично участие в проекти на ФНИ и **6-ма** учени участват в други проекти.

➤ ИОНХ има спечелен проект «Подкрепа за организиране на международни конференции в страната» към ФНИ-МОН.

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

Националните разпределени програми и проекти в ИОНХ осигуриха:

✓ поддържане на инфраструктурата, 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, бизнес и училища;

С цялостната си научноизследователска дейност, ИОНХ интегрира българската наука в Европейското изследователско пространство, в изпълнение на НСРНИ 2017-2030.

В съответствие с Дейност 1.3. от НСРНИ, **активностите в ИОНХ са насочени към развитието на научния потенциал** и поддържане на високо научно ниво на изследванията. През 2022 г., **6 млади специалисти са назначени на работа в ИОНХ и 8 млади учени** са привлечени на работа по проекти. В рамките на компонента 2 от бюджета на ИОНХ се извършва допълнително диференцирано заплащане на учените в ИОНХ, обвързано с постигнати резултати и атестацията на учените на всеки три години. Осигуряват се финансови стимули за привличане на повече млади хора към докторантура и постдокторантура. През 2022 г. мобилността на учените е значителна: осъществени са **29 командировки в чужбина** 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 2022 г. в ИОНХ са приети нов „Правилник за вътрешния трудов ред на ИОНХ“, „План за насърчаване на равенството между жените и мъжете в ИОНХ“ и „Статут на асоцииран член ИОНХ“, и са актуализирани „Правилник за прилагане на ЗРАСРБ в ИОНХ“ и „Правилник за устройството дейността на ИОНХ“.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности

- 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 опазване на околната среда, за интелигентни оптични приложения и на биоматериали с приложение в ортопедията и денталната медицина с цел 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 разработване на продукти за козметика/медицинска козметика, които са на пазара. Оценка за качеството на тези продукти са нарастващите поръчки от бизнеса за производство и разработка на нови козметични продукти на основата на луга. <http://blackseastars.bg/>

За поредна година, ИОНХ участва в изпълнението на три Национални научни програми за решаване на икономически и социални предизвикателства в полза за обществото.

- По програма „**Нисковъглеродна енергия за бита и транспорта**“ ЕПЛЮС, ИОНХ работи по задачи на Компонента 1 "Съхранение и преобразуване на възобновяема енергия" и Компонент 3 "Ефективни методи за улавяне и

оползотворяване на CO₂". Изследванията водят до разработването на ново поколение материали за съхранение на енергия.

- 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 рамките на ННП е направена **оценка на качеството на водите в реки (Дунав, Марица)**, преминаващи през големи градове на България, повлияно от промяна в броя на населението през последните години и респ. промени в развитието на строителството и промишлеността в съответните градове.

- 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“. В рамките на програмата е **заявено ново изобретение** „Процес и реактор за получаване на магнезиев хидроген карбонат“ от доц. д-р Иван Узунов.

- Активно участие на ИОНХ във форума „Наука за бизнес“, който е съвместна инициатива на БАН и Изпълнителната агенция за насърчаване на малките и средните предприятия с подкрепата на МОН и Министерството на икономиката. С две презентации за представени постиженията в ИОНХ пред представители на бизнеса от страната и чужбина с цел установяване на контакти.

- 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.

- Извършват се **сервизни анализи**, консултации и експертизи за нуждите на фирми за подпомагане на икономическото и индустриално развитие на страната. Например: с пламъково атомноабсорбционен метод е определено съдържанието на Na в проби от течни добавки за цименти, предоставени от „Сика България“ ЕООД; с XPS е анализиран елементният състав на кабелни компоненти предоставени от фирма ЛЕМ БГ ЕООД; чрез РФЕ е направен анализ на материал за балистична защита на фирма MARS ARMOR; с прахов рентгенов дифрактометър са извършени анализи за фирмите STOPOD INVEST HOLDING EAD, Sensata Technologies, Булгартрансгаз ЕАД, Калцит АД - Асеновград.

- **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 2022 г., един докторант в ИОНХ е защитил по докторска програма „Аналитична химия“. В ИОНХ се обучават докторанти на ФХФ-СУ, ИЕЕС-БАН и ИЕ-БАН в рамките на 4 съвместни докторантури, като двама от тях са защитили успешно дисертационните си трудове. В рамките на програмата „Студентски практики“ 20 студента от ХТМУ, ФХФ-СУ, ФзФ-СУ и Лесотехническият университет са провели обучителен стаж в Лабораториите на ИОНХ, като някои от тях продължават работата си в щатния състав на ИОНХ. В рамките на два проекта по програма „Вихрен“ са привлечени млади специалисти и студенти (8) за тяхното изпълнение. Въпреки

инициативите, предоставените финансови възможности и научна среда за привличане на млади учени, в ИОНХ остават незаети щатни бройки. През 2022 г., ИОНХ участва активно в мероприятия насочени към ученическата общност: проведена е ученическа практика за ученици от ЧОУ „St. George International School & Preschool“; участие във XII Софийски фестивал на науката и Европейска нощ на учените 2022 година; разработен в лабораторията ССПР проект „Проучване на качеството на водата и седиментите в Силистренския сектор на река Дунав“ от ученик Мохаммад-Мурад Рашад Халвани спечели първа награда от Ученическият институт на БАН.

Повиши се информираността на обществото за достиженията на науката и за научните аспекти на актуални проблеми чрез обществени изяви:

- Участие на ИОНХ в Софийски фестивал на науката 2022 г. с щанд „Красива наука с ИОНХ“ (М. Ганчева, Цв. Захариев, Н. Стоянова-Нанкова, Й. Тупарова).
- Участие на ИОНХ в Европейска нощ на учените 2022 година с щанд „Наука и практики, новости и приложения“ (М. Ганчева, Цв. Захариев, Н. Стоянова-Нанкова). На тези форуми, научната дейност на ИОНХ е представена под формата на постери, брошури, демонстрации и експерименти.
- Участие на ИОНХ във второто издание „Наука и бизнес“, събитие на Изпълнителната агенция за насърчаване на малките и средните предприятия (ИАНМСП) и Българската академия на науките (БАН). Презентации „Термоелектричен оксиден материал“ (С. Харизанова) и „Електродни материали за натриево-йонни батерии“ (М. Калъпсзова) за текущите разработки в лаборатория ИИМ в ИОНХ-БАН. <https://sofiatech.bg/event/nauka-za-biznes-vol-2/>
- Участие на ИОНХ в мероприятията посветено на Международната година на стъклото, 2022 с лекция на проф. д-р Рени Йорданова „Синтез, структура и луминесцентни свойства на волфраматни стъкла, съдържащи Nb₂O₅“.
- Във в-к НОМО SCIENS излязоха четири публикации: за акад. Константин Хаджииванов, проф. д-р Радостина Стоянова – директор на ИОНХ, и гл. ас. д-р Мария Калъпсзова и ас. Нина Стоянова-Нанкова, изпълняващи проекти по Националната стипендия "За жените в науката" 2021.
- Медийни изяви на акад. Константин Хаджииванов: по БНР на тема „52-ма българи от БАН са повлияли на световната наука през 2021 година“ <https://bnr.bg/post/101722138/52-ma-balgari-ot-ban-sa-povliiali-na-svetovnata-nauka-prez-2021-godina>; по телевизия Еuronews под заглавие „Български изследователи от БАН се нареждат сред топ учените в света“, <https://euronewsbulgaria.com/news/5651/bulgarski-izsledovateli-ot-ban-se-narezhdad-sred-top-uchenite-v-sveta>; „Необходима е култура в партньорството научни изследвания – бизнес. Голяма част от учените са узрели за това“ Интервю във в-к "Азбуки" бр. 10, 2022 г. https://press.azbuki.bg/news/novini-2022/broj-10-2022/akad-konstantin-hadzhiiyanov-zamestnik-ministar-na-obrazovaniето-i-naukata-horata-sa-osnovniyat-dvigatel-na-naukataneobhodima-e-kultura-v-partnorstvoto-nauchni-izsledvaniya-biznes-golya/?fbclid=IwAR1Nz4yIx-9-uc5cuF02hy2fOaSVZSb_UES39D7baVweK5yiC5yfZNGEUlw
- Проф. Радостина Стоянова представя „БАН работи върху създаване на натриево-йонни батерии за съхранение на енергия“ в предаване „Светът е бизнес“ по Bloomberg TV Bulgaria. https://www.bloombergtv.bg/a/16-biznes-start/111564-ban-raboti-varhu-sazdavane-na-natrievo-yonni-baterii-za-sahranenie-na-energiya?fbclid=IwAR0ANpxfyRhVZypy6XfLWQ_K1k1XCOK71E-jxHowLG-ZR6XFX0fpGC1fMI
- Участия в медиите на гл. ас. Мария Калъпсзова, стипендиант на Националната стипендия "За жените в науката" 2021:
 - по БНР, Радио София, Ритъмът на столицата с Антония Каменичка с интервю „У нас жените в науката имат равностойно присъствие с мъжете“ <https://bnr.bg/post/101743760/maria-kalapsazova>

- по БНТ в предаването 100% будни, „Млад учен от БАН разработва иновативно решение за съхранение на зелена енергия“, https://bnt.bg/news/mlad-uchen-ot-ban-razrabotka-inovativno-reshenie-za-sahranenie-na-zelena-energiya-v323682-307589news.html?fbclid=IwAR3TBwK4pKe4_zgF70ZrIYQj1_Qdvwv_5vHNNErVAnDp70Mx17cbs63HaO0
 - по БНР Радио София, Радиобафе с Ива Дойчинова, „Жените в науката“, https://bnr.bg/sofia/post/101599761/jenite-v-naukata?fbclid=IwAR24vp46bX-padkJs4vPodutj_QxWlQ2ohO5EVlvXUM9gzUrtxDdQ-cqL6Q
 - вестник "Аз-Буки", автор: Зина Соколова, статия „Батерии за зелена енергия“, <https://press.azbuki.bg/news/novini-2022/broj-5-2022/baterii-za-zelena-energiya/?fbclid=IwAR2DaVQpNUcftpTFwtjjiGDSHbNazuxiq7XbmPltHz9LmMdO4HTrxI-wrZCd4>
 - Участия в медиите на ас. Нина Стоянова-Нанкова, стипендиант на Национална стипендия "За жените в науката" 2021:
 - по БНР и предаването Хоризонт до обед, На 29 ноември обявяват новите призвори по програмата "За жените в науката", <https://bnr.bg/horizont/post/101741759/jeni-ucheni>
 - по телевизия btv в предаването 120 минути, "Красив ум": „Българка изследва антивирусните свойства на стайно растение срещу коронавируси“, <https://btvnovinite.bg/predavania/120-minuti/za-zhenite-v-naukata-balgarka-izsledva-anitivursnite-svoystva-na-rastenieto-kamenen-lotos.html>
 - по БНР в Лабиринти на познанието, „Нина Нанкова за пътя на жените в науката“, https://bnr.bg/hristobotev/post/101637559?fbclid=IwAR19IYVX_tf3FjmojtpAR1uHeZl4T3czlklSVPWwbl7mDUinQVjOgPHFoI4
 - в предаването Социална мрежа, „Лекарство срещу COVID-19: Български учен изследва тайландско растение“, <https://nova.bg/news/view/2022/04/05/363962/%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D0%B0%D1%80%D1%81%D1%82%D0%B2%D0%BE-%D1%81%D1%80%D0%B5%D1%89%D1%83-covid-19-%D0%B1%D1%8A%D0%BB%D0%B3%D0%B0%D1%80%D1%81%D0%BA%D0%B8-%D1%83%D1%87%D0%B5%D0%BD-%D0%B8%D0%B7%D1%81%D0%BB%D0%B5>
 - по БНР, в предаването Ритъмът на столицата, „Каменен лотос помага в борбата срещу херпес и коронавирус“, <https://bnr.bg/sofia/post/101623080/kamenen-lotos-pomaga-v-borbata-sreshtu-herpes-i-koronavirus>
 - по телевизия Евроком, в предаването Училище за родители, „Нина Нанкова за растение, което лекува човешките коронавируси“, <https://eurocom.bg/show/uchilishche-za-roditeli/13593>
 - по БНР Радио София, Радиобафе с Ива Дойчинова, „Жените в науката“, https://bnr.bg/sofia/post/101599761/jenite-v-naukata?fbclid=IwAR24vp46bX-padkJs4vPodutj_QxWlQ2ohO5EVlvXUM9gzUrtxDdQ-cqL6Q
 - Лекция на доц. д-р Д. Панайотов на Семинар на Събранието на академиците и член-кореспондентите на БАН на тема „Съвременни и перспективни методи за улавяне, съхранение, конверсия и оползотворяване на CO₂ – потенциал за смекчаване изменението на климата“
 - Презентации във Факултет по инженерство, Катедра по материали, Имперски колеж в Лондон по време на работното посещение на учени от ИОНХ в Лондон в рамките на проекта TwinTeam на тема:
 - „Advanced materials developed in IGIC-BAS: theoretical and experimental insight“, лектор проф. И. Георгиева
 - „Research Topics in the Laboratory of Electron Spectroscopy of Solid Surface“, лектор гл. ас. Ал. Цанев
 - Презентация в Института по материалознание, гр. Севиля Испания на тема „Нови системи на базата на калциев фосфат с подобрена биоминерализационна активност“ лектор проф. д-р Диана Рабаджиева
- В резултат на високо обществено признание през 2022 г.**
- Ас. Нина Стоянова-Нанкова е удостоена с награда "Иван Евстратиев Гешов" за най-млади учени до 30 години.

- Гл. ас. София Славова е номинирана като млад учен да представлява България в 71 среща на Нобелови лауреати.

1.4. Взаимоотношения с други институции

В рамките на проект Европейски научни мрежи TwinTeam, ИОНХ развива международното сътрудничество с три водещи научни организации от Англия, Германия и Испания.

Учени от ИОНХ си сътрудничат 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 (21) с партньори: Висши училища (ФХФ-СУ, ХТМУ-София, ФзФ-СУ, Аграрен университет, Пловдив) и Институти на БАН (ИК, ИОХЦФ, ИЕЕС, ИП, ИЕ, ИОМТ, ИМК, ИКИТ, ИФХ, ИЕМПА).
- Договор с Бургаски университет "Проф. д-р Асен Златаров" за количествено определяне на химичен състав.
- Сътрудничества в рамките на съвместни изследвания и публикации (116).

Учени от ИОНХ участват в **експертни органи** в областта на науката и висшето образование. По-важните са: Министерство на образованието и науката (заместник-министър на образованието и науката, акад. К. Хаджииванов), Трети Експертен съвет за наука, технологии и иновации към Кмета на Столична община (член, проф. Р. Стоянова), IUPAC Division VI, Chemistry and the Environment (национален представител, проф. Д. Рабаджиева); IUPAC Subcommittee on Solubility and Equilibrium data, Division V, Analytical Chemistry (титулярен член, ГОСТ-проф. Хр. Баларев), Национален комитет към Международния съюз по чиста и приложна химия (проф. Диана Рабаджиева и проф. Радостина Стоянова), Жури в конкурс за докторска стипендия на Фондация Карол Знание (член на жури, проф. Р. Стоянова).

Експертизи в помощ на институции и органи: Доклад по писмена заявка - експертна оценка на Магистърска програма „Интелигентна аналитика“ по проект МОДЕРН-А на СУ, финансиран от ОПНОИР „Модернизация на висшите училища“ за СУ „Св. Климент Охридски“ и Асоциацията на индустриалния капитал в България.

Участие на учени в **органи на управление на научни учреждения, организации и ВУ:** Международен съюз по кристалография (член в Комисия по прахова дифракция, проф. Д. Ковачева), Национален координационен съвет по нанотехнологии (проф. Д. Ковачева), Управителен съвет на Българско кристалографско дружество (зам. председател проф. Д. Ковачева, член доц. П. Цветков), Division of Computational and Theoretical Chemistry of European Chemical Society (национален делегат, проф. И. Георгиева).

Участие на учени в **съвети, комисии и други експертни органи на външни за БАН институции:** Акад. К. Хаджииванов - Държавна Агенция „Електронно управление“ (МСПД) и неговата Експертна работна група (ЕРГ), Национална изследователска мрежа, Европейска академия, Комитет за наблюдение на ОП „Наука и образование за интелигентен растеж“ (МОН), Национален съвет за наука и иновации, Национален координационен съвет по нанотехнологии (доц. И. Стамболова), доц. С. Тепавичарова - 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 (доц. И. Узунов).

Рецензии и становища по процедури. Учени от ИОНХ са ценени и търсени експерти и през 2022 г., 18 учени от тях са изготвили **31** рецензии и становища по процедури за научни степени и академични длъжности към ИОНХ, Институт на БАН (ИМК, ИОХЦФ, ИЕЕС, ГИ), ФХФ-СУ, ФФ на МУ-София, ХТМУ-София, ПУ-Пловдив, Punjab Technical University, Jalandhar, Индия, Университет "Проф. д-р Асен Златаров" – Бургас и ФДМ при МУ-София. Изготвени са **13** рецензии за проекти на ФНИ и други научни организации в чужбина и **145** анонимни рецензии (от 18 учени) на статии за специализирани списания.

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, Международен съюз за чиста и приложна химия;
- *национални научни дружества* - Българско кристалографско дружество, Клуб на българските катализи, Съюз на химиците в България, Съюз на учените в България, Сдружение на олимпийските отбори по природни науки, Българско зеолитно дружество, Българско дружество по стъкло и керамика;
- *редакционни колегии* - Chemical Engineering Journal (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, Science Academique;
- *организационен комитет на научен форум*: международен научен форум върху методи и материали за чисти технологии MetMat2022; 11-а Национална конференция по химия „Образование по химия за обществено разбиране на науката“ и 49-а Национална конференция на учителите по химия.

1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата

1.5.1. Практически дейности:

- Лаборатория ИИМ участва чрез проф. Радостина Стоянова като член в Третия Експертен съвет за наука, технологии и иновации към Кмета на Столична община.
- Учени от ИОНХ са изготвили рецензии на проекти към научни фондове извън България: ETH Zurich Research Commission, Research Foundation Flanders, European Research Council и OCENW.M.21.261 (Нидерландия).
- 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 2022 г. са разработени и нотифицирани **15 нови козметични продукти** по поръчки на бизнеса, сключени са **2 нови договора с партньори от Англия и Германия** и **2 договора с партньори от България**. 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.
- С наличното оборудване в ИОНХ са извършени **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 OSTOPOD INVEST HOLDING EAD, Sensata Technologies, Булгартрансгаз ЕАД, Сика България ЕООД, ЛЕМ БГ ЕООД, MARS ARMOR, Калцит АД – Асеновград, МЦ Уроелит.

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

➤ Разработват се паладий–съдържащи катализатори, модифицирани с метални оксиди, нанесени върху индустриален носител за работа в реакции на окисление на летливи органични съединения в отпадни газове.

➤ В процес на изграждане и тестови изпитания са експериментални (многореакторна и пилотна) системи за проследяване на термичната стабилност и устойчивост на катализатори в присъствие на каталитични отрови.

➤ През 2022 г. е оценено качеството на води от река Марица в района на гр. Пловдив и река Дунав в района на гр. Силистра. Реките са относително чисти в изследваните райони по отношение на нутриенти и преходни метали. Освен води, от река Дунав са изследвани и седименти. Резултатите от тоталното съдържание показват превишено съдържание на Cu, Zn, Pb и Cd спрямо нормите за предохранителни концентрации на преходни метали в пясъчливи почви съгласно НАРЕДБА No3/2008 на МОСВ, което е индикация за минали замърсявания.

Обобщени и сравнени са данните получени и отчетени през 2021 г за река Искър и три нейни притока – река Лесновска, река Какач и река Блато в района на Столична община. Показано е, че високите стойности на нутриентите PO_4^{3-} , NO_2^- , NO_3^- и NH_4^+ в река Искър и нейните притоци са причина за значително отклоняване от оптималното съотношение N/P = 16 за развитие на биоорганизмите.

Термодинамично изчислените форми на преходните метали във всички тествани води показват, че Pb във водите на реките Дунав, Искър, Лесновска, Какач и Блато, както и Fe и Al в река Марица, ще се натрупват в прилежащите на водите растения, тъй като са под формата на лесно усвояеми от растенията органометални комплекси. От друга страна, Mn е по-опасен за животинския свят, тъй като е предимно под формата на свободни йони, които лесно взаимодействат с лиганди на органични съединения, намиращи се в кръвния поток и/или в органите. Zn заема междинно положение и неговите форми силно зависят от рН на средата. При по-ниско рН доминират органометалните комплекси, а при високо рН – хидрокси и карбонатни форми. И в двата случая обаче са изчислени и присъствие на свободни Zn^{2+} йони.

➤ В сътрудничество с Факултет по Дентална медицина, МУ-Пловдив се правят тестови изпитания на произведени сплави по патентована технология в ИОНХ за прилагането им в зъбопротезирането.

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

ИОНХ участва в три Национални научни програми, две инфпаструктурни програми, една национална програма „Млади учени и постдокторанти-2“ като дейностите и резултатите за 2022 г. се представят в цялостния отчет на програмите към МОН

Проекти по ННП	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
„Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни	БАН и СУ	проф. д-р Диана Рабаджиева

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

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2022

2. Резултати от научноизследователската дейност през 2022 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 Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“

➤ На базата на собствени и литературни изследвания е проведен задълбочен анализ върху предимствата и недостатъците на два типа перспективни батерии: широко разпространените „dual-ion“ батерии, базирани на ко-интеркалация на катиони и аниони и на новопредложените от нас хибридни метал-йонни батерии, работещи на основата на ко-интеркалация само на катиони. Показано е, че ко-интеркалацията на моновалентни йони (като Li^+ и Na^+ , Li^+ и K^+ , Na^+ и K^+ и др.) или на двойки моно- и поливалентни йони (като Li^+ и Mg^{2+} , Na^+ и Mg^{2+} , Na^+ и Zn^{2+} , H^+ и Zn^{2+} и др.) е ефективна стратегия за разработване на батерии от следващо поколение с подобрена производителност, както и с понижена цена със запазване или подобряване на енергийната плътност на литиево-йонните батерии. Очертани са основните научни задачи, чието решаване ще допринесе за ускоряване развитието на хибридните поливалентни метал-йонни батерии и за практическото им осъществяване в най-скоро време. Резултатите от този критичен анализ са публикувани в едно от най-престижните списания ChemSusChem (IF=9.140), като авторският колектив включва само учени от Лабораторията.

➤ Сравнени са два подхода за подобряване на електрохимичните свойства на слоести натриево-никелово-манганови оксиди. Единият се състои в селективното заместване на никелови йони с алуминий, а другият – в повърхностно модифициране на оксида с Al_2O_3 . Показано е, че алуминиевите йони стабилизират дву-слоеното подреждане при оксидите и водят до подобряване на неговата циклична стабилност. Повърхностното модифициране с Al_2O_3 е най-ефективно в случаите на незаместените оксиди, където подобряването на електрохимичните свойства се дължи на потискане на взаимодействието „електрод-електролит“.

➤ В рамките на проект TwinTeam са осъществени визити на трима учени от Лабораторията при партньорите от Институт по приложни материали към Института по технологии в Карлсруе, Германия. Там бяха проведени *in-situ* XRD и XAS изследвания на електрохимични натриеви клетки, както и *ex-situ* XPS на работили електроди на магнезий-дотирани натриеви никелово-манганови оксиди (чисти и покрити с CeO_2 и Al_2O_3). Зедно с това са проведени *in-situ* Raman изследвания при галваностатично електрохимично циклиране на моделна клетка $\text{Li}_2\text{Mn}(\text{SO}_4)_2|\text{LiPF}_6\text{-EC:DMC}|\text{Li}$.

Установена е структурна трансформация на $\text{Li}_2\text{Mn}(\text{SO}_4)_2$ в $\text{Li}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$ по време на електрохимичния процес.

➤ Разработен е иновативен подход за синтез на натриево-титанови оксиди под формата на нано-жички. Подходът се състои в хидротермално третиране на натриево-титанови смеси при определени налягания и температури. Натриево-титановите оксиди са тествани като анодни материали в натриеви йонни и хибридни литиево-натриеви клетки. Структурните промени след циклиране на електродите са изследвани посредством *ex-situ* XRD и TEM. Показано е, че нано-жичките от натриево-титановите оксиди проявяват изключителни електрохимични свойства: при 6 мин. заряд на натриевата клетка електродите освобождават капацитет около 50 mAh/g.

➤ Проведени са първоначални изследвания върху синтеза на смесен фосфатно-сулфатен материал на основата на желязо и ванадий като перспективен електрод за натриево-йонни батерии. Приложени са два иновативни метода на синтез на меката химия, а именно лиофилизация и хидротермален синтез. Образоването на смесените фосфати-сулфати е доказано чрез серия от физико-химични методи. Първоначалните електрохимични изследвания показват, че смесените фосфатно-сулфатни материали представляват перспективни електроди за натриево-йонни батерии.

➤ Концепцията за постигане на колосални интеркалационни капацитети бе развита към фосфатни системи, чрез повърхностната им модификация с CeO_2 . Показано е, че CeO_2 има благоприятен ефект върху цикличната стабилност на натриево-железен фосфат и върху стабилността на капацитета при високи токови натоварвания.

➤ Изследвана е електрохимичната активност на натриево-манганово-кобалтови сулфати ($\text{Na}_2\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x(\text{SO}_4)_3$, $x = 0.19, 0.37, 0.54$) в моделни триелектродни клетки в режим на циклична волтаметрия. Експериментите са проведени за метали, литий или натрий като противоелектрод и сравнителен електрод, и различни литиеви и натриеви електролити на базата на йонни течности. Установено е, че изследваните алкални преходно-метални сулфати имат хибридно поведение в зависимост от плътността на тока.

➤ Чрез лиофилизация и последващо отгряване са получени 100% чисти $\text{Li}_2\text{Mn}(\text{SO}_4)_2$ и $\text{Li}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$. С получените литиево-манганови сулфати са направени електрохимични тестове в различни електролитни среди в потенциостатичен режим (циклична волтаметрия) при различни плътности на тока с до пет порядъка разлика и при различни температури - 20, 40 и 60°C. Изчислен е електрохимичният капацитет. Експериментите са осъществени на новозакупена многоканална циклична система Biologic VMP-3e и лабораторни термостати Binder KB53.

➤ За създаването на по-безвредни и по-мощни батерии е необходимо да се разработи нов тип електроден материал, който съчетава колосален интеркалационен капацитет с наложените екологични изисквания. На базата на теоретични изчисления в периодични условия бе моделирана нова метал-органична структура, която показва енергийна плътност, надвишаваща тази на конвенционалните неорганични и органични електроди. Проектираната метал-органична структура съдържа Ni(II) йони свързани чрез 2,5-дициано-р-бензохинонови линкери по такъв начин, че всички компоненти могат да участват в редокс-реакцията на взаимодействие с литий, натрий и магнезий. Предсказано е, че най-висок капацитет и енергийна плътност се постига при литиране на метал-органичната структура, докато при взаимодействието с Na и Mg се осъществява по-добра структурна стабилност. Теоретичните резултати показват, че метал-органичните структури са обещаващ избор за „зелен“ електроден материал (с малко от 10% съдържание на тежки метали).

➤ В резултат на сътрудничество с проф. Brahim El Bali от Департамент по химия към Университет Мохамед Първи, Мароко са изследвани електрохимично (чрез циклична волтаметрия и галваностатично) натриеви молибдати като катодни материали. Тестовете са проведени в моделни натриеви клетки в присъствие на различни електролити като са подбрани най-подходящите.

➤ Благодарение на договорни отношения с фирмите Cabot и Graphit Kropfmühl GmbH, през годината започнаха изследвания на въглеродни материали с различна степен на въглификация като анодни материали за натриево-йонни батерии. Изследванията включват провеждане на галваностатични тестове в моделни електрохимични клетки при стайна и повишена температура.

➤ Способността на кубичен магнезиево манганов шпинел, Mg_2MnO_4 да интеркалира обратимо Mg^{2+} йони бе изследвана съвместно с учени от Университета в гр. Кордоба (Испания). Показано е, че интеркалацията на Mg^{2+} в шпинела протича при средно напрежение от 2.1 V, при което се освобождава капацитет около 160 mAh/g. Интеркалационната реакция е съпроводена с ограничено обемно разширение на шпинела от около около 8,7 %.

Хибридни материали за суперкондензаторни системи

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

➤ Съвместно с колеги от ИЕЕС-БАН е проведено сравнително изследване за влиянието на съотношението Mn/Ni, структурата и морфологията върху електрохимичните характеристики на оксиди, хидроксиди и фосфати като хибридни суперкондензатори в алкални водни електролити. Показано е, че реализирането на съотношение Mn/Ni близко до 1 и сферична морфология на частиците са от основно значение за постигане на много добри електрохимични параметри, докато анионната компонента в състава на електродите е по-несъществена. Най-високи енергийна плътност и плътност на мощността ($65Wh\ kg^{-1}$ при $3200W\ kg^{-1}$, съответно) и добра циклична стабилност са постигнати при илменитен тип оксид, $NiMnO_3$. Капацитивните характеристики на смесените мангано-никелови фосфати с оливинова и марицитна структура превъзхождат повече от два пъти тези в литературата, но е необходимо по-нататъшно оптимизиране на морфологията за постигане на още по-добри параметри.

Нанокмпозитни материали за акумулиране на водород

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

➤ Продължени са изследванията на сорбционните характеристики по отношение на водород при образци на базата на MgH_2 с добавки от V и активен въглен, получен от различни селскостопански отпадъчни продукти. Сравняването с предишни резултати показва по-силно изразен положителен ефект на добавката от Ni, отколкото V, както по отношение на кинетика на хидриране, така и на достигнат абсорбционен капацитет.

➤ Получена е сплав Mg-Ni-Al-Fe-V след 50 часа смилане в планетарна мелница под аргон, като в сплав от типа MgNi, Ni е заместен частично от Al, Fe и V. С увеличаване на продължителността на смилане, резултатите от охарактеризирането показват съществено аморфизиране, което най-бързо се установява при магнезия. Образецът показва много добра кинетика на хидриране и за 2 мин. достига капацитет от 2 мас. % H_2 . Дори и при стайна температура той се хидрира с добра кинетика и абсорбционният

капацитет е със стойност 1.6 мас. % H₂. Тези изследвания са част от работната програма по двустранен проект с Университет Мугла, Турция, финансиран от бюджета на БАН.

➤ След смилане 30 часа в планетарна мелница под аргон е получен образец със състав Mg_{2.1}Ni. Измерени са общо 10 цикъла на хидриране/дехидриране. Дехидрирането е проведено при 280 и 300 °C и при налягане 0.15 МРа, като при пониската температура в рамките на един час не е измерена никаква десорбция. С нарастването на броя на циклите, максималната стойност на абсорбционния капацитет не се променя съществено и остава около 3 мас.% при 300 °C, но кинетиката на хидриране се подобрява. Този образец ще бъде тестван, като анод в NiMH батерии и е част от работната програма по проект Национален център по мехатроника и чисти технологии.

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 изпълнението на тази задача.

➤ Синтезирани са многокомпонентни обемни стъкла от системата ZnO-B₂O₃-Bi₂O₃-WO₃, чисти и дотирани с Eu₂O₃. Стъклата се характеризират с високи температури на застъкляване (над 490°C) и кристализация (над 650°C), добра термична стабилност (Δ 90°C) и висока плътност – между 5.084 и 5.105 g/cm³. WO₃ модифицира структурата на двукомпонентното ZnO-B₂O₃ стъкло като води до увеличаване на броя на групите BO₃ с немостови кислородни атоми, в резултат на което нараства структурният безпорядък в аморфните мрежи. Това е предпоставка за добро разпределение на активния Eu³⁺ йон в аморфната матрица и е указание, че тези състави стъкла са подходящи обекти за разработване на нови стъклени матрици с потенциално оптично приложение.

➤ Синтезирани са стъкла със състав 50ZnO:40B₂O₃:5WO₃:5Nb₂O₅:xEu₂O₃, (x = 0, 0.1, 0.5, 1, 2, 5 and 10 mol%). Изследвана е тяхната структура, физикохимични, термични и фотолуминесцентни свойства с цел да се провери възможността за потенциалното им приложение като оптични материали с характеристична червена емисия във видимата област. Резултатите показват, че аморфната структура се заздравява и става по-деформирана с увеличаване на Eu₂O₃, което е указание, че тези стъкла са подходящи матрици за вграждане на активния Eu³⁺ йон. Добавянето на WO₃ към двукомпонентното 50ZnO-50B₂O₃ стъкло, както и добавянето на Nb₂O₅ към трикомпонентното 50ZnO-40B₂O₃-10WO₃ стъкло доведе до значително повишаване на интензитета на червената емисия при 613 nm.

➤ Чрез термично третиране на дотирани с европий стъкла от системата CaO-GeO₂-Li₂O-B₂O₃ са получени стъклокерамики с различни кристални фази: Li₂CaGeO₄, Ca₂GeO₄ и Ca₅Ge₃O₁₁. Получените образци са с различна степен на кристалност, различен размер на частиците (5 до 20 nm) и степен на аморфност от 20 до 60%. Заснети са луминесцентните спектри и от тях са пресметнати цветните координати на образците, които са много близки до тези на червения цвят (0.6270, 0.3726).

➤ Прилагайки твърдофазен метод на синтез са получени дотирани с диспросий образци от съединенията Li₂CaGeO₄, Ca₂GeO₄ и Ca₅Ge₃O₁₁. Чрез SEM са анализирани размерът и разпределението на частиците, формата и тенденцията към агломерация. Установено е, че основен фактор, който влияе върху интензитета на луминесценцията е степента на кристалност на образците, т.е. по-слабо изкривяване на полиедрите.

Агломерирането на частиците и появата на страни и ръбове намалява интензитета на емисията. Размерът и разпределението на частиците имат незначително влияние.

➤ Успешно са синтезирани дву- и трикомпонентни $\text{TeO}_2/\text{TiO}_2/\text{V}_2\text{O}_5$ стъкла съдържащи над 60 мол% TeO_2 . Структурното им характеризирание показва, че за разликата от бинарните състави, трикомпонентните съдържат по-голям брой смесени мостови връзки, което обяснява и формирането на по-плътната им аморфна структура.

➤ Съвместно с ИЕЕС-БАН са получени филми от ZrO_2 дотирани със самарий (0.5–5 at.%) чрез зол-гел метод. Рентгеновата фотоелектронна спектроскопия (XPS) разкри наличието на въглеродни примеси, както и изместване на ръба на валентната зона (VB) към по-ниски свързващи енергии с увеличаване на нивото на добавка. Получените филми имат много високо съотношение на интензитета на емисиите на акцептор/донор ($I_a/I_d = 25$), което ги прави обещаващи кандидати за приложения в областта на фотониката, включително в разработването на бели светодиоди.

➤ Съвместно с учени от ЦІ СЕНЕИ – БАН са отложени NiO_x филми чрез зол-гел метода. Изследвано е влиянието на температурите на отгряване върху оптичните, структурните и електрическите свойства на филмите от никелови оксиди. XPS анализът показва, че филмите от NiO_x се състоят от две фази NiO и Ni_2O_3 . Присъствието на окислителното състояние Ni^{3+} допринася за р-тип проводимост на филмите. Тънките слоеве от NiO_x показват добра електрическа проводимост от р-тип със специфично съпротивление от около $4.8 \times 10^{-3} \Omega\text{-cm}$, което ги прави подходящи за използване като широколентови полупроводници и като слой за транспортиране на дупки (HTL) в прозрачни слънчеви клетки.

➤ Заедно с колеги от ИЕ-БАН са проведени изследвания върху технология за лазерно микро- и наноструктуриране на керамики. Чрез XPS, XRD и електрични изследвания са охарактеризирани керамики AlN и Si_3N_4 и е оценено влиянието на различни параметри на лазерното лъчение за модифициране на повърхността им. Получените резултати имат значение за разработването на технология за лазерната обработка на керамики при проектирането на структури с потенциални приложения в микроелектрониката.

Нанокмпозитни материали с биомедицинско приложение

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

➤ Изследвано е утаяването на калциеви фосфати в полимерни хидрогели от полисулфобетаин (PSB) или поликарбоксибетаин (PCB) при вариране съотношенията Ca^{2+} :полимер, последователността на смесване на изходните разтвори и рН. Установено е, че независимо от условията на синтез в присъствие на PCB калциевофосфатната фаза в получения хибриден материал е слабокристален хидроксиапатит. В присъствие на PSB, калциевофосфатната фаза е смес от октакалциев фосфат и дикалциевфосфат дихидрат. Съотношението между двете соли зависи от рН на средата. Получените резултати доказват различният ефект на карбоксигрупата от PCB и на сулфогрупата от PSB върху вида на утаените калциеви фосфати.

➤ Получени са трифазни [хидроксиапатит (HA), α - и β – трикалциев фосфат (α/β – TCP)] керамични прахове чрез високоенергийно смилане на еквимоларна смес от $\text{Ca}(\text{OH})_2$ и CaHPO_4 и последващо стъпаловидно синтероване до 1350 °C. Съотношението между фазите зависи от продължителността на смилането. Установено е, че с увеличаване времето на смилане до 24-тия час, едновременно протичат

процесите на аморфизирание на изходните вещества и образуване на калциеведефицитен НА, който се е трансформирал в стехиометричен след 48 ч. Прилики в структурните елементи, изграждащи кристалните структури на НА и CaHPO_4 обясняват фазовата трансформация. Предложен е механизъм на фазово превръщане при синтерование на изходни смеси.

➤ Термодинамично са моделирани системите $\text{L} - \text{CaCl}_2 - \text{MgCl}_2 - \text{SBFc} - \text{H}_2\text{O}$ и $\text{L} - \text{ZnCl}_2 - \text{SBFc} - \text{H}_2\text{O}$ ($\text{L} = \text{Glycine (Gly), Alanine (Ala), Valine (Val), SBFc}$ – симулирана тъканна течност съдържаща Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , HPO_4^{2-} , HCO_3^{2-} , Cl^- , SO_4^{2-}) при вариране концентрациите на аминокиселините. Изчислени са доминиращите в системите форми на Ca , Mg и Zn . Установено е, че концентрацията на метал-органичните комплекси в разтворите нараства от разредени към концентрирани разтвори и в реда $\text{MVal}^+ < \text{MAla}^+ < \text{MGly}^+$ ($\text{M} = \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$). За дадена киселина стабилността на комплексите нараства в реда $\text{CaL}^+ < \text{MgL}^+ < \text{ZnL}^+$. Тези зависимости обясняват най-ниското съдържание на Mg^{2+} и Zn^{2+} йони в експериментално получените в концентрирани разтвори на глицин калциевофосфатни утайки и нарастването му в утайките получени в концентрирани разтвори на аланин и валин.

➤ Във връзка с разработването на нови материали за реминерализация на зъбния емайл е оценен е ефектът от състава на изкуствената слюнка върху поведението на два калциево фосфатни материала различно дотирани с Mg^{2+} и Zn^{2+} йони. Установени са нивата на извличане на Mg^{2+} и Zn^{2+} йони с времето, както и скоростта на превръщане на аморфната фаза в слабокристален костоподобен хидроксиапатит.

➤ Изследвани са стъклокерамики (термично третирани образци) от система – $16\text{Na}_2\text{O}/10\text{CaO}/(74-x)\text{SiO}_2/x\text{Fe}_2\text{O}_3$. Посредством XPS анализ е доказано, че количеството на немостовите NBOs (Si-O-Na и Si-O-Fe) връзки нарастват с увеличаване на съдържанието на Fe_2O_3 в стъклата, както и с времето на термично третиране. Количеството немостови връзки NBO за стъклото, съдържащо 30 mol% Fe_2O_3 , не зависи от времето на термична обработка. Установено е, че отношението $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ също се мени с времето на термотретиране, както и със съдържанието на Fe_2O_3 в стъклата. Показано е, че стъклата съдържащи 30 mol% Fe_2O_3 съдържат предимно магнетит, поради стехиометрията на Fe_3O_4 , за която $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ отношение трябва да бъде 1:2, т. е. 0.33:0.67.

➤ Получени са фотолуминесцентни зол-гел наноразмерни филми от $\text{Gd}(0.5-5\%) - \text{ZrO}_2$ върху силициеви подложки. Тънките слоеве са хомогенни, с равномерна повърхност с индекс на пречупване $n=1.83$. Недотираните филми показват широка виолетово-синя PL емисия, докато дотирането с Gd^{3+} йони води до нови тесни ивици, както в UV-B диапазона, така и във видимия диапазон. Интензивното излъчване, регистрирано при дължина на вълната 313 nm, може да намери полезно приложение в медицински лампи за лечение на различни кожни болести.

➤ Нанокompозити от медни и сребърни частици с редуциран графенов оксид са получени чрез лесен и щадящ околната среда метод. Мед-съдържащият композит има значителен антимикуробен ефект спрямо *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* и *Candida albicans*, а за сребро-съдържащия композит този ефект е по-слаб. Нанокompозитите показват висока цитотоксичност и към два типа еукариотни клетки. Високата биологична активност на композитите се дължи на специфичния им фазов състав, морфология и разпределение на частиците.

➤ Определени са физикохимичните свойства на инжекционен хидрогел на базата на термочувствителен полимер и тяхното влияние върху цитотоксичността и кардиотоксичността на система за доставяне на лекарството доксорубин.

- Съвместно с колеги от ФФ на МУ-София е установено успешното капсулиране и трансформация на канабидиол в аморфна форма при разработването на натоварени с канабидиол полимерни наномицели (Pluronic P123 или неговата комбинация с Pluronic F127) като система за доставяне на лекарства с неврозащитни ефекти. Зареждането на мицелите с канабидиол води до по-ниска цитотоксичност на лекарството върху невронните клетки и по-силни невропротективни ефекти срещу индуциран оксидативен стрес.
- В сътрудничеството с колеги от Факултет по Дентална медицина, МУ-Пловдив, са проведени сравнителни изследвания на разработени в ИОНХ Ni- и Co- базирани сплави, с приложение в денталната медицина, получени по методите на праховата металургия (ПМ) и такива произведени посредством високотемпературно сплавяне и Selective Laser Melting (SLM). ПМ-методът показва значителни икономически и технологични предимства като структурна хомогенност, по-добра якост на опън и постоянство на свойствата на получените крайни продукти: метало - керамични конструкции (мостове, коронки и др.).

Перовскитни материали за преобразуване на енергия

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

- Чрез магнетронно разпръскване са получени тънки филми от калциево-кобалтови оксиди, характеризиращи се с интересни термоелектрични свойства. В слоя кобалтовите йони се стабилизират в степен на окисление 3+, смесено спиново състояние, докато в прахообразните оксиди, кобалтовите йони заемат ниско спиново състояние. Разликите в спиновите състояния на кобалта определят и техните различни електрични свойства и топлопроводност. Тези изследвания се провеждат съвместно с изследователската група на д-р Петров от Имперския колеж (Лондон).
- Съместно с учени от Имперския колеж (Лондон) са изследвани диелектричните свойства на бариево-калциеви сплави дотирани с цирконий, титан и калай. В зависимост от условията на синтез и степен на дотиране е определена връзката между електричните им и диелектрични свойства. Тези изследвания се провеждат благодарение на специализацията на учен от Лабораторията в Имперския колеж (Лондон).
- В сътрудничество с колеги от Македония са изучени изоструктурните фазови преходи на перовскита $C(NH_2)_3PbI_3$. Предсказана е нова фаза на базата на наблюдавана изобестична точка при 47–48 °С в инфрачервените и Раман спектри. Установено е, че фазовият преход е изоструктурен, тъй като той няма промяна на пространствената група на перовскитната структура според рентгеновия анализ и липсва допълнителен пик при тази температура според диференциалния термичен анализ.

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

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

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

➤ Получени са данни за структурните и каталитичните свойства на серия от монокомпонентни Mn и двукомпонентни Mn–Ce катализатори, нанесени върху SBA-15 за пълно окисление на метан, пропан и бутан. Въз основа на данните от каталитичните експерименти и математическото моделиране на кинетиката на реакцията може да се заключи, че механизъмът на Mars - van Krevelen е най- вероятен за реакция на пълно окисление на пропан.

➤ Получени са данни за каталитичните свойства и възможностите за приложение на насени върху морденит Pt и биметални Pt-Cu наночастици при реакции на пълно окисление на метан и пропан.

➤ Проведени са каталитични тестове в реакция на пълно окисление на бутан на $\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{FeO}_3$ ($x= 0.01 - 0.05$) катализатори, синтезирани по механохимичен път. Резултатите показват, че всички синтезирани проби имат висока каталитична активност, като добавянето на Ce към La в LaFeO_3 не променя съществено активността. Направено е заключение, че изследваните образци могат да бъдат използвани като активна фаза при получаване на катализатори за опазване на околна среда.

➤ Съвместно с колеги от ИОХЦФ са изследвани синтезирани за пръв път висококачествени активни въглени с висока повърхност от отработено моторно масло и различни пластмасови остатъци. Установен е силен регулиращ ефект на топологията на порите върху дисперсността, фазовия състав и каталитичното поведение на нанесени желязо-хромни оксиди за разлагане на метанол, като определящ е видът на използваните пластмасови компоненти. Добавката от остатъци от полиетилен с висока плътност осигурява образуване на активен въглен с добре развита мезопорьозност, което стабилизира фино диспергирани, достъпни и силно активни смесени Fe-Cr оксиди. Добавяне на термопластични фенол-формалдехидни смоли води до висока микропорьозност и ограничава получаването на бинарни оксиди, което се отразява на по-ниската каталитична активност.

➤ Чрез комбинация от зелен синтез с последваща хидротермална обработка са получени наночастици от ZnO. Като прекурсор е използван цинков ацетат, за утаител – урея, а в ролята на стабилизиращ и редуциращ агент: екстракт от листа на *Mentha Arvensis*. Установени са серия от полезни физикохимични ефекти като: намаляване на размера на кристалитите, повишен дял на мезопорите, образуване на двуфазна кристална структура (хидроцинцит и вюрцит), по-малка стойност на забранената зона и образуване на дефекти в решетката от типа (Znⁱ и V_O). Всички тези ефекти водят до повишена фотокаталитична ефективност при реакцията за обезцветяване на моделно багрило малахитово зелено под UV светлина. Този евтин и екологично чист подход разширява практическото приложение на биосинтезирания ZnO не само като фотокатализатор, но и в други области, свързани с опазване на околната среда, човешкото здраве, както и създаването на високо ефективни защитни корозионно-устойчиви материали.

➤ Съвместно с колеги от ИЕ-БАН са получени У-тип хексаферити по метода на изгаряне от разтвор, в които част от стронция е заменен с барий и в магнитната подрешетка присъстват различни комбинации от Ni, Zn, Mg. Изучени са условията за синтез на монофазни образци. Структурното изследване показва позициите, които се

заемат от йоните на Ni, Zn и Mg. Оценени са техните характеристики с оглед приложение за поглъщане на високочестотни електромагнитни излъчвания.

➤ Чрез XPS са изследвани фулерени, комбинирани с манганов оксид, получени от колеги от ИЕЕС–БАН, за електрокаталитично превръщане на сулфити в сулфати. Изследванията показват повишено съдържание на sp^3 връзки, водещо до повишена каталитична способност на получените материали.

➤ Като част от съвместни изследвания с ИОХЦФ, чрез XPS и XRD са изследвани серия от Ni- и/или Ru-модифицирани ZSM-5 зеолитни катализатори. С XPS анализите е установено, че добавянето на рутений в биметални системи води до по-висока дисперсия на никела, което обуславя висока активност и селективност на системата 10Ni5RuZSM-5 в реакцията на хидрогениране на CO_2 до метан.

Оксидни тънки слоеве и нанопрахове за фотокаталитични приложения

Темата се изпълнява от учени от Лабораториите „Високотемпературни оксидни системи“, „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“ и „Кристалохимия на композитни материали“.

➤ Изследвани са фотокаталитичните и антибактериални свойства на получени по зол-гелен метод $TiO_2/TeO_2/ZnO$ прахове с различно съдържание на TiO_2 . Изследваните проби показваха добра антибактериална активност срещу *E. coli K12* и биха могли да разширят спектъра на различни антимикробни агенти с обещаващи медицински приложения.

➤ Успешно е приложен методът на механохимично активиране за получаване на $SrMoO_4$, $SrWO_4$, $CaMoO_4$ и $CaWO_4$ при стайна температура. Получените материали излъчват синя емисия в областта от 420 до 470 nm, като $CaMoO_4$ се характеризира и с зелена емисия при 530 nm. $CaMoO_4$ дотиран с Dy (0.5 до 2 at.%) показва жълта луминесценция, характерна за активния йон, която е най-силно интензивна при дотиране с 1.5 at. % Dy. От луминесцентните спектри са изчислени цветните координати, които се много близки до тези на бялата светлина ($x=0.30$ и $y=0.33$).

➤ В сътрудничество с колеги от ИФТТ–БАН са направени анализи и интерпретация на данни върху отложени с ALD тънки филми от ZnO дотирани с Fe, Co и Ni върху различни подложки. Резултатите от рентгеновите изследвания показват, че тънките слоеве от чист ZnO се отлагат така, че равнините с индекс (002) да са успоредни на подложката, докато при заместените слоеве, паралелни на повърхността на подложката се оказват най-вече равнините с индекси (100). Този ефект е най-силно изразен при заместването с кобалт.

➤ Съвместни изследвания с ИФХ демонстрират корозионното поведение и защитната способност на хибридни цинкови покрития с полимер-модифицирани наночастици от CuO. Установено е, че хибридно покритие подобрява антикорозионното поведение на нисковъглеродната стомана във времеви интервал от 35 дни и при условия на външна поляризация. Тестовете показват много по-голяма устойчивост на корозия на хибридно покритие в изкуствена морска вода в сравнение с 5% разтвор на NaCl. Предложеното хибридно цинково покритие има потенциал за приложение срещу обрастване (antifouling) в морска среда.

➤ Изследвани са фотокаталитични системи, получени в САН – Белград, на основата на TiO_2 , модифицирани с преходни метали – Mn, Ni, Co, за фотокаталитично разлагане на метил оранж. Изследванията с XPS потвърждават, че бисмутът е включен

в анатаза под формата на V_2O_3 , който осигурява високата фотокаталитична активност на получените материали.

Сорбенти за пречистване на течности

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

➤ *Изследване на ефективността на отпадъчни растителни материали от маточина и лавандула след извличането на етеричните масла от тях за очистване на водни разтвори от медни йони:* Изследвана е адсорбцията на Cu(II) йони върху два отпадни продукта от маточина и лавандула, предоставени от Дестилерия “Етерични масла и билки”, с. Жельо Войвода. Изучено е влиянието на основните параметри, влияещи върху адсорбционния процес и са установени оптималните условия за провеждане му. Показано е, че уравнението на Лангмюир описва най-добре равновесните експериментални данни. Адсорбционният капацитет на отпадните продукти по отношение на медни йони е малко по-нисък от този на изходните материали – маточина и лавандула, но е достатъчно висок за използването им като сорбенти за очистване на Cu(II) от замърсени води. Това показва, че биосорбцията е една възможност за практическо приложение на тези отпадъчни материали след предварителното извличане на ценните етерични масла от тях. Това предоставя възможност и за оползотворяване на отпадъците от дестилериите за масла и прилагането им в адсорбционни процеси, свързани с опазване на околната среда.

Адсорбенти за CO_2 и за съхранение и пречистване на съвременни горива

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

➤ Посредством взаимодействие на зеолит H-ZSM-5 с пари от CuCl е получен материал, който селективно адсорбира CO в поток от водород и изглежда перспективен за очистване на водородно гориво за горивни клетки. Така проведенният твърдофазен обмен постига висока концентрация от активните Cu^+ центрове в зеолита, които лесно се регенерират и трудно се блокират от вода, тъй като формират смесени $\text{Cu}^+(\text{CO})(\text{H}_2\text{O})_x$ комплекси.

➤ Проведено е детайлно ИЧ спектроскопско изследване на адсорбцията на CO_2 в зеолит NaY. В резултат на това е установено, че при стайна температура и налягания до 50 mbar се образуват нелинейни $\text{Na}^+\cdots\text{O}-\text{C}-\text{O}$ комплекси. При повишаване на налягането (или понижаване на температурата) настъпва преориентация на CO_2 молекулите, а по-нататък се формират димери $(\text{Na}^+\cdots\text{O}-\text{C}-\text{O})_2$ и втора молекула CO_2 се адсорбира към вече зает Na^+ център. Получените резултати показват възможността за едновременно свързване на две молекули CO_2 към един катионен център в зеолит, което отваря нови хоризонти за дизайна на адсорбенти за CO_2 с голям капацитет.

➤ *In situ* ИЧ спектроскопия е използвана за изясняване на вида на достъпните адсорбционни центрове в зеолити тип X, синтезирани чрез алкална конверсия на летлива пепел от лигнитни въглища с различно съдържание на варовик. Установено е, че ролята на Ca в получения зеолит е да увеличи броя на Na^+ катиони в достъпни позиции, където те могат едновременно да адсорбират две CO или CO_2 молекули и да благоприятстват адсорбционния капацитет.

Инфрачервена спектроскопия на повърхностни съединения и механизми на каталитични реакции

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

➤ На базата на *in situ* ИЧ изследвания (като част от комплексно физикохимично охарактеризиране) на микроструктурата на катализатора Ni/FeCeO_x и на механизма на разлагане на метанол е установен синергизъм между активността на Ni частици и носителя. Метанолът първоначално се адсорбира върху носителя като линейни и мостови метокси групи. След това последователно се превръща във формиати и карбонати с повишаване на реакционната температура. Същевременно катализаторът се редуцира, което се подпомага от разположените в близост NiO частици. Ефективността на катализатора в реакционна среда се контролира от фазовите трансформации до метали и сплави и промените в интерфейса цериев-железен оксид, като по този начин се променят вида и пропорцията на различните междинни съединения и продукти.

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

Темата се изпълнява от учени от Лабораторията „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“

➤ В сътрудничество с колеги от ИЕ-БАН са изследвани наноструктури от чист ZnO; дотиран с благородни метали (Pd, Ag и PdAg) ZnO, както и композитни ZnO:Zn₂TiO₄ структури. Чрез XPS е определено химичното състояние на повърхността им. Изследвани са сензорните им свойства за откриване на пари на етанол, ацетон, амоняк и CO. При оптимизирано облъчване с UV и червена светлина е постигната реакция на сензорния елемент ZnO:Zn₂TiO₄ към ниска концентрация на CO от 250 ppb при стайна температура. Сензорният слой PdAg-ZnO показва реакция към на пари на ацетон с концентрации под 1 ppm, което го прави обещаващ слой за проектирането на високоефективни сензори, подходящи за диагностициране на диабет.

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 Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“

Част от работата по темата се финансира от ННП „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)“ и е описана в т. 1.5.1 и 1.5.2 от настоящия отчет.

➤ Потвърдена е ефективността от прилагане на йон-асоциативен и Стокхолм Хюмик модели за термодинамично изчисляване на формите на преходните метали в природни разтвори чрез сравняване на експериментално определени с изчислени стойности за концентрации на: (1) лабилни форми на Pb във води от реките Бабинска и Разметаница от района на ТЕЦ Бобов дол и почвени екстракти на прилежащи почви и (2) тотални концентрации на Al и Fe във води на езерото Маратон, Гърция след отчитане на спонтанни утайтелни процеси.

➤ Аналитично са охарактеризирани екстракти с 0.01 M KNO₃ от осем почви от района на ТЕЦ Бобов дол. Екстрагентът е избран за извличане, както на водоразтворимите форми на преходните метали (Al, Fe, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Cd, Pb) в почвите, така и йонообменните им форми, които съвкупно определят мобилността на металите в почвите. От всички изследвани метали се екстрахират Pb (от всички почви), Al, Fe, Mn и Ni (от три от почвите

в непосредствена близост до ТЕЦ Бобов дол). Co, Zn и Cd не се екстрахират (концентрациите са под границите на откриване), а Cu – само от две от почвите в концентрации на порядък по-ниски от тези на останалите метали. Изчислените коефициенти на мобилност показват най-високи стойности за Pb последвани от тези за Ni, на порядък по-ниски за Mn и на 2-3 порядъка по-ниски за Al и Fe.

➤ Чрез прилагане на термодинамичен подход е изчислено разпределението на формите на Pb в четири от изследваните екстракти, както и във води от реките Бабинска и Разметаница, взети в непосредствена близост до почвените проби. Изчисленията са направени в два случая: (1) без отчитане на спонтанни утаителни процеси; и (2) с включена възможност за спонтанно утаяване. Резултатите показват, че при почвените екстракти спонтанните утаителни процеси не оказват влияние на разпределението на формите на Pb. Изчислени са между 97.7 и 99.9% метал-органични комплекси с фулвични киселини, и 0.01 – 2.5 % лабилни форми – свободни йони и неорганични комплексни форми. Във водите разликите в разпределението на формите в двата вида изчисления е съществена, тъй като те са преситени по отношение на карбонатни соли и хидроксида. Резултатите показват, че без отчитане на спонтанна кристализация са изчислени съответно между 73.6 и 95.5 % метал-органични комплекси с фулвични киселини и между 4.5 и 26.4 % неорганични лабилни форми. Включвайки възможните спонтанни утаителни процеси в модела, процента на лабилните форми се редуцира до 1.4 – 8.3%, а органометалните комплекси нарастват до – 91.2 - 98.6%.

➤ Концентрацията на лабилните форми на Pb във всички изследвани води и почвени екстракти са определени експериментално по метода на DPASV (Diferential pulse anodic stripping voltammetry) в Лабораторията по химия на околната среда, Национален и Каподистриан Университет на Атина, Гърция. Установена е много добра зависимост между изчислените и експериментално определените стойности за почвени екстракти, които варират между 0.3 и 2.4 % от тоталната концентрация на Pb. За водите експериментално определените стойности са между 0.5 и 3 %. Те корелират с изчислените стойности за лабилни Pb форми във водите с отчитане на спонтанни утаителни процеси (1.4 – 8.3%). Тази разлика между изчислени и експериментално определени концентрации на лабилните форми на Pb във води може да се обясни с по-голямото им отклонение от равновесното състояние, което е условие при термодинамичните изчисления, в сравнение с почвените екстракти получени в лабораторни условия.

➤ В рамките на нерегламентирано дългогодишно сътрудничество с Университет на Атина са изчислени формите на Al, Cu, Zn, Cd, Pb, Fe, Mn, Cr, Ni, As, V във води от 3 пункта на изкуствено езеро Маратон, намиращо се до гр. Атина и служещо за резервоар за питейна вода на града. Аналитичните данни са предоставени от гръцка страна и касаят две пробоземания – през февруари и юни 2022 от три пункта на езерото на две дълбочини. Приложен е Модел на йонна асоциация за изчисляване на неорганични форми, и Стокхолм Хюмик Модел за изчисляване на органичните химични форми. Високото съдържание на разтворен кислород във водите определя доминирането на двойката $O_2/O_2(aq)$ върху окислително-редукционните процеси и съответно присъствието на форми на As(V), Cr(VI), V(V), Cu(II), Fe(III) и Mn(II), които са стабилни в окислителна среда. Установено е, че между 95 и 100% неорганични химични форми са характерни за As(V), Cr(VI), V(V) и Mn(II), а аналогичен процент органични форми с фулвичните киселини за - Cu(II), Fe(III) и Pb(II). За останалите елементи Al(III), Ni(II), Zn(II) и Cd(II) съотношението между неорганични и органични форми варира в зависимост от рН на средата и природата на елемента.

➤ Водните проби, взети от повърхността са преситени по отношение на $Al(OH)_3$ и $Fe(OH)_3$ за разлика от пробите взети в дълбочина. Включването на спонтанна кристализация на двата хидроксида в модела води до редуциране концентрациите на Al

и Fe, което корелира много добре с измерените в дълбочина концентрации. Това е още едно доказателство за приложимостта на избраните от нас модели.

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

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

➤ Продължава разработването на технологии за получаване на нови продукти на основата на черноморска луга и кал. През 2022 г. са разработени и нотифицирани **15 нови козметични продукти по поръчки на бизнеса.**

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“

➤ Данните за минералния елементен състав на десет растителни материала от групата на етерично-маслените растения са групирани по степента на сходство и подобие с помощта на йерархичен клъстерен анализ. Базата данни включва 10 обекта (растителните материали), описани чрез 28 променливи (концентрациите на анализите). Химичните променливи са групирани в пет клъстера. Това доказва, че химичният състав на 10-те растителни материала е повлиян от пет главни фактора, свързани най-вероятно с качеството на почвите – замърсяване на почвите от (1) цветната металургия, (2) използвани торове и (3) емисии от ТЕЦ-овете, както и от (4) естествения солеви почвен състав и (5) съставните елементи на земната кора. Елементите от три от клъстерите са предимно от антропогенен произход и могат да бъдат отнесени към различни области на човешката дейност, докато елементите, формиращи другите два клъстера са свързани с естествения състав на почвите и на скалите, рудите и минералите, които изграждат земната кора. Йерархичната дендрограма за клъстеризацията на десетте растителни обекта показва формиране на два главни клъстера. Това разделение е свързано с биологичните особености на растителните образци. Както се очакваше, двата материала, получени след екстракцията на етеричните масла от съответните растения, формират отделен подклъстер.

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

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

➤ С цел оптимизиране на разработената от нас процедура за извличане на рений от цементационен меден концентрат, произвеждан в „Асарел“, е проведена серия от експерименти, при които проби от концентрата се накисват директно във вода без предварително нагряване, след което се подлагат на ултразвукова (УЗ) обработка при различни температури. Установено е, че при обработка на проби в температурния интервал 20 - 50 °С в течение на 30 мин. се извличат 87% от съдържащия се в концентрата рений. При работа в температурния интервал 50 - 80°С за същото време във водните извлеци преминава 90% от рения. Резултатите от експериментите показват, че УЗ обработка на концентрата може да бъде добра алтернатива на неговата предварителна термична обработка, която е енергоемка и отнема много повече време.

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“ и „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“.

➤ Съвместно с колеги от ХТМУ-София са изследвани с ЕПР спектроскопия условията за екстракция на Gd^{3+} в йонни течности.

➤ Посредством ЕПР са изследвани комплексобразуващите свойства на влакнести материали на основата на Шифова база, хитозан и 8-хидроксихинолин-2-карбоксалдехид с Cu^{2+} и Fe^{3+} йони. Получените резултати за координацията на Cu^{2+} и Fe^{3+} е важна за вникване в антибактериалните свойства на тези композити. Изследванията се провеждат съвместно с учени от ИП-БАН.

➤ Координационните свойства на медни йони в неводни разтвори на тилозин и тилмикозин са изследвани с ЕПР спектроскопия. Показано е образуването на моно- и дву-ядрени комплекси чрез участие на O- и N-лиганди.

➤ Изследвана е възможността за получаване на графеноподобни фази (дефектиран графен, графенов оксид и редуциран графенов оксид) като фини суспензии чрез прилагане на нов подход на импулсна лазерна аблация (PLA) в режим на поток. Фазовият състав и структура на новополучените суспензии са изследвани чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия, рентгенова дифрактометрия и раманова спектроскопия. Показано е, че с този метод могат да бъдат получени облъчени суспензии, съдържащи главно наномашабни въглеродни фази (графен и подобни на графен (дефектен графен, rGO и GO) и снопове от подобни на графен люспи). Новият подход на PLAL (Pulse Laser Ablation in liquid) позволява контролиране на средата и оттук ефективна функционализация на обработените въглеродни материали с различни видове атоми.

➤ Изследвано е хетероепитаксиалното отлагане на SiC върху Si субстрати чрез CVD процеси, използващи два прекурсора: прекурсор, съдържащ въглерод (CH_4) и прекурсор, съдържащ Si (трихлорсилан $SiHCl_3$ или подобен) или метални органични съединения като системи за отлагане на атомен слой. Чрез XPS е показано, че SiC се образува върху Si субстрат в резултат на двете условия на отлагане. Това е първото успешно отлагане на SiC върху Si чрез директна карбонизация на силициевия субстрат.

➤ Съвместно с ИЕ-БАН са получени и изследвани серия от диамантеноподобни въглеродни (DLC) филми, които са отложени чрез електронно-лъчево физическо отлагане от пари (electron-beam physical vapor deposition) при различни температури и различни мощности. Фотоелектронният C_{1s} спектър доказва наличието на смес от sp^2 и sp^3 хибридизация с преобладаване на sp^3 въглерод. Това твърдение се потвърждава и от измерения d-параметър от диференцирания Оже спектър на въглерода (C KLL). Най-голямото количество диамант се наблюдава за покритие, получено при 300 °C, което е доказателство за по-добра плътност и хомогенност на филма.

➤ Чрез XPS е изследвано влиянието на фосфатни покрития, получени в ИФХ- БАН върху корозионната резистентност на покритата с церий алуминиева сплав – Al 1050. Установено е силно намаляване на концентрацията на Al_2O_3 и $Ce_2O_3+CeO_2$ за сметка на

образуването на AlPO_4 и AlOOH , CePO_4 , както и PO_3^- , P_2O_5 и P_4O_{10} съединения на Al и Ce, което значително повишава корозионната резистентност на алуминиевата сплав.

➤ Чрез XPS са изследвани комбинирани цинк-цериеви покрития, получени в ХТМУ, с цел подобряване на корозионното поведение на нисковъглеродна стомана. Анализът на повърхността показва, че в резултат на електроотлагането на цинк и спонтанното образуване на цериеви конверсионни слоеве, се е осъществило плътното ѝ покриване със смес от Zn, ZnO, $\text{Zn}(\text{OH})_2$ и CeO_2 , съпътствано от изчерпване и частична редукция на Ce(IV) до Ce(III). С помощта на XPS изследванията е установено, че нисковъглеродната стомана може да бъде ефикасно защитена от корозия с цериеви конверсионни покрития след цинкова галванизация.

➤ Чрез XPS са изследвани слоеве от нанокристален h-BN и c-BN. Слоевите са получени чрез магнетронно разпръскване върху стоманени подложки от колеги от ИКИТ – БАН. Доказана е ролята на допълнителната термична обработка върху формирането на тези слоеве. Показано е, че пълно превръщане до стехиометричен нанокристален борен нитрид се осъществява при температура от 850 °C.

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

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

➤ С моделни изчисления на европиеви комплекси $\text{Eu}(\text{Phen})_2\text{X}_3$ ($\text{X} \equiv \text{Cl}^-$, NO_3^-) върху хидрофобна $\text{Si-O-Si}(\text{CH}_3)_3$ и хидрофилна Si-O-Si-OH силикатна повърхност и симулиране на фотофизичните и спектроскопски свойства е изяснено влиянието на матрицата и противойона върху луминесцентния квантов добив на европиевия фенантролинов комплекс. С помощта на полу-емпирични и simplified DFT изчисления са оценени промените в структурните параметри, и абсорбционните и емисионните характеристики, предсказан е механизма на пренос на енергия в моделните системи и са установени факторите, отговорни за предсказания по-висок квантов добив за европиевия комплекс в хидрофилна матрица в сравнение с хидрофобната. Получените резултати от изчисленията са в добро съгласие с наличните експериментални данни.

➤ Съвместно с колеги от ИМК-БАН са изследвани новополучени кристални структури на $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{ReO}_4)_2$ (неутрален) и $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{U})_4](\text{ReO}_4)_2$, $[\text{Mg}(\text{U})_6](\text{ReO}_4)_2$ (йонни) комплекси с лиганда урея. С DFT(PAW/PBE) изчисления в периодични условия са изучени електронните (плътност на състоянията), вибрационните и оптичните свойства на кристалните структури. Предсказано е, че стабилността на системите нараства с увеличаване на молекулите уреята в комплекса, което е в синхрон с увеличаване ковалентен принос на Mg-Ou връзката, по-високата точка на топене и оптималната термична резистентност. Установено е, че включването на урея в комплексите разширява абсорбционната UV област до 395 nm. Над тази област кристалните структури се характеризират с широк прозорец на прозрачност и подобрени оптични свойства.

➤ За изясняване на фазовите преходи, вибрационното поведение (ИЧ и Раманови спектри) и оптичните свойства на хибридният материал $\text{NH}_3(\text{CH}_2)_7\text{NH}_3\text{BiCl}_5$, неговите структурни и спектроскопски характеристики, нековалентни взаимодействия между молекулите в кристала и електронна структура са изследвани с теоретичния DFT/GGA/PBE метод за периодични условия. Наблюдаваното излъчване във видимата област при 483 nm (с възбуждане при 396 nm), прави материала подходящ за приложение като UV филтър и син фотолуминесцентен емитер. Емисионните свойства

са обяснени с електронния пренос от $Cl_{(3p)}$ към $Vi_{(6p)}$ нивата. Изследването е в сътрудничество с учени от Университет Ибн Тофайл, Мароко.

➤ Изследвани са дисулфидни кълстери на желязо и кобалт за възможността да бъдат модифицирани електрон-акцепторните и електрон-донорните им свойства посредством координация на хлоридни и карбонилни лиганди, както и взаимодействията им с катиони на алкалните елементи (Li^+ и Na^+). Използвани са метода на функционала на електронната плътност B3LYP и метода на свързаните кълстери, CCSD(T). Установено е, че карбонилните лиганди в много по-голяма степен взаимодействат с центрoвете на преходния метал и индуцират повишена електронна плътност при сулфидните атоми. Процесът на изомеризация дисулфид-персулфид има основна роля при каталитичните и фото-каталитичните окислително-редукционни реакции. При кобалтово-сулфидните кълстери и тетракарбонили се наблюдават ниско енергетични преходи в близката ИЧ област, подходящи за фотокаталитична активация.

➤ С DFT/TD-DFT изчисления, е изследвано фотофизичното поведение на клас полиядрени комплекси $[Au@Ag_4(Py_3P)_4]X_5$ и $[Au@Cu_4(Py_3P)_4]X_5$ [$X = NO_3, ClO_4, OTf, BF_4, SbF_6$]. На базата на изчислените енергетични диаграми на съответните комплекси е показан механизъм на луминесценция и е оценена ролята на активното синглетно състояние S_n и най-ниското S_1 във фотофизичните процеси. Установено е, че активното състояние S_n се определя като MLCT (metal-ligand charge transfer) орбитален преход за всички структури, а наблюдаваната емисия се отнася към MLCT или LLCT (ligand-ligand charge transfer) характер в зависимост от състава на ядрото на кълстера. Теоретичният анализ на комплексите $Au@Ag_4$, $Au@Cu_4$ и $Ag@Ag_4$ показва слаби металофилни взаимодействия между Au и Ag/Cu атоми, което означава, че те не играят съществена роля върху фотофизичните свойства на разглежданите комплекси.

➤ С помощта на TD-DFT изчисления на абсорбционните спектри за серия от $[Cu(Xantphos)(N^*N)]^+$ комплекси с различни периферни N^*N лиганди (N^*N е заместен 5-фенил-бипиридин) е подпомогнато обяснението на тяхното сложно емисионно поведение като е изяснена ролята на заместителите върху фотофизичните свойства и механизъм на пренос на енергия. Теоретичните енергетични диаграми и анализът на природата на възбудените състояния на повечето комплекси показва, че преходът на най-ниските синглетни (S_1) състояния е с MLCT характер, от Cu(I) към N^*N лиганда, докато за триплетните (T_1) състояния, преходите са N^*N вътрешнолигандни. Получените резултати могат да се използват, както за дизайн на нови материали на основата на Cu(I) комплекси с контролирани оптоелектронни свойства на молекулно ниво, така и на хибридни системи.

➤ Посредством неемирични квантово-химични методи е изследвана тавтомерията и енергетичните бариери на тавтомерно превръщане при цитозин, цитидин и дезоксицитидин в газова фаза и във воден разтвор. Установено е, че в газова фаза съществуват 5 тавтомерни форми на цитозин с енергетична разлика до 2.5 kcal/mol между тях, докато във вода, втори оксо-амино тавтомер и имино-енолен тавтомер съществуват съвместно с каноничния тавтомер. Подобни резултати са получени и за трихидратираните цитидинови и 2-деоксицитидинови тавтомерни форми. При тях се стабилизират различни конформери на най-стабилните тавтомери. Установено е, че реакциите с протонен пренос са подпомогнати от молекула вода и протичат чрез асинхронен съгласуван механизъм. Предсказано е съвместното съществуване на петхидратиран цитозинови тавтомери, както и трихидратираните им нуклеозиди, които биха могли да се потвърдят чрез нови спектроскопски методи, като 2D IR, LA-MB-FT-MW и NMR спектроскопия с променлива температура.

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

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

➤ Разтвори от единични макровключения от минерала галенит (Мадански рудни находища, България) са анализирани с помощта на метода масспектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-MS). Получени са данни за концентрациите на елементите Na, K, Ca, Li, Mg, Al, Fe, Cu, Zn, Pb, Rb и Ba, както и за общата соленост на разтворите. Подготвен и анализиран е синтетичен разтвор (“Synsol”) с йонен състав, близък до този на изследваните включения. Разсейването на резултатите е около 10% за главните елементи и до 20-40% за следовите елементи, което е приемливо. Направено е и сравнение на йонния състав на разтворите с включенията в два минерала – кварц и галенит от едно и също рудно находище – Крушев дол.

➤ Определено е съдържанието на есенциалните елементи Ca, Mg, Zn, Mn, Fe и Cu в търговски продукти, изготвени на базата на гел от медицинското растение *Aloe Vera* и в проби от микроводораслото *Spirulina*, култивирани в биореактори в Белгия, Китай, САЩ и България. Експериментите са извършени като част от по-широко изследване на хранителните и лечебните свойства на тези растения, в което са ангажирани специалисти от медицинските университети в Плевен и Варна, и университети в Квебек (Канада) и Бумердес (Алжир). Анализът на пробите е извършен с техниките на FAAS (Flame Atomic Absorption Spectroscopy) и ICP-OS (Inductively coupled plasma - optical emission spectrometry) анализа след предварителното им разлагане и привеждане в разтвор. Установено е, че чистият *Aloe Vera* гел е богат на Mg и Fe, докато продуктите, които съдържат добавки от мед, сироп от агава и пюре от акай бери се отличават с високо съдържание на Mg и Mn. Концентрациите на изследваните елементи в пробите от *Spirulina* варират в зависимост от производителите като най-общо следват тенденцията: Mg > Fe > Mn > Zn > Cu. Очаквано съдържанието на Mg е най-високо в сравнение с останалите елементи, тъй като той е макронутриент за растенията, а контрацията на Fe значително надвишава концентрациите на другите микроелементи. Произведена в България *Spirulina* се отличава от останалите продукти с по-високо съдържание на Zn и Cu.

➤ Разработена е методика за определяне съдържанието на Ca, Zn и Mg в сложна матрица от неорганични и органични компоненти формиращи състава и вискозитета на изкуствената слюнка чрез TXRF (Total reflection X-rays fluorescence) и FAAS техники. Установено е, че наличието на органични компоненти в слюнката и най-вече на муцин увеличава разтворимостта на аморфния калциев фосфат и отделянето на Mg²⁺ (6 и 10%) и Zn²⁺ (0.2 и 0.5%) йони в течната фаза нарства, поради способността му да образува комплекси с изследваните метали. Най-интензивен е процесът на разтваряне през първите 6 часа, по време на което слюнката се обогатява с изследваните йони, след което постепенно тяхната концентрация намалява и достига постоянна стойност.

➤ Синтетичен моделен разтвор, съдържащ Na, K, Ca, Fe, Mn, Cu, Zn, Pb, Rb и Ba в концентрации, близки до състава на течните включения в минералите е анализиран с рентгенова флуоресценция с пълно отражение. Оптимизирани са параметрите на експеримента. Като вътрешен стандарт е използван Ga. Установено е добро съвпадение на приготвения състав и получените аналитични резултати, което прави TXRF анализа подходящ бърз и прост микроаналитичен метод за едновременно определяне на голям брой елементи във флуидни включения при концентрации, вариращи от проценти до ниво на следи.

2.1. Най-значимо научно постижение в ИОНХ

КИСЛОРОДНИ РЕДОКС РЕАКЦИИ ЗА КОНТРОЛ НА СВОЙСТВАТА НА ЕЛЕКТРОДНИ МАТЕРИАЛИ ЗА НАТРИЕВО-ЙОННИ БАТЕРИИ

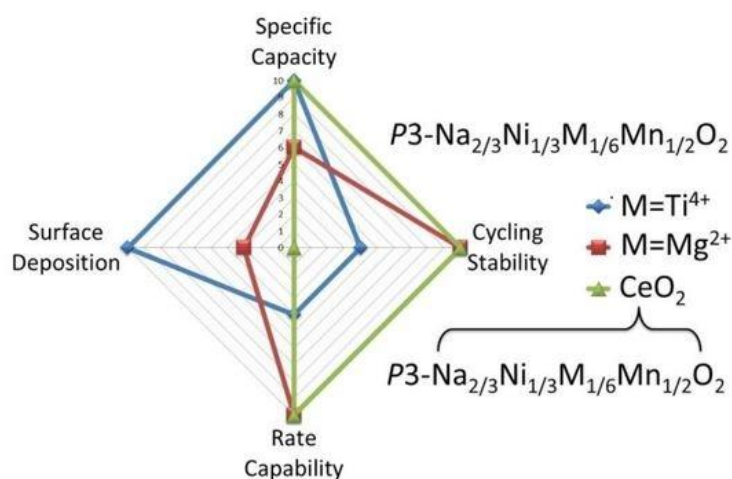


Схема за подбор на най-добрия електроден материал.

Натриево-йонните батерии имат огромен потенциал да бъдат в близко бъдеще евтината и достъпна технология за съхранение на енергия от възобновяеми източници. За да се реализира този потенциал научното предизвикателство е да се разработят електродни материали с висок специфичен капацитет, който да бъде стабилен при продължително циклиране на батерията. Научен колектив от Институт по обща и неорганична химия към Българска академия на науките показва за първи път, че удвояване на капацитета може да се постигне при нестехиометрични по отношение на натрий слоеви оксиди чрез регулиране на редокс реакциите на решетъчния кислород по пътя на рационална комбинация от метални заместители и модификатори за съхранение на кислород. Изследването демонстрира, че модификаторът цериев диоксид, CeO₂, допринася за увеличаване на специфичния капацитет на слоевите оксиди, докато металните заместители (като магнезий и титан) контролират тяхната циклична стабилност при различни токови натоварвания. В резултат от комбинирането на двата подхода е избран най-добрият електроден материал за натриево-йонни батерии, а именно Mg-заместен оксид модифициран с CeO₂. Той показва висок капацитет, отлична циклична стабилност и изключителна способност за работа при различни токови натоварвания, т.е параметри надвишаващи тези, публикувани в литературата.

В своята новост научното постижение може да отвори нови насоки за разработване на електродни материали с колосален капацитет и проектирани, както за натриеви, така и за литиево-йонни батерии.

Ръководител: гл.ас. д-р Мария Калъпсъзова и проф. д-р Радостина Стоянова

Статия: Kalapsazova, M.; Kukeva, R.; Zhecheva, E.; Stoyanova, R. "Metal Substitution versus Oxygen-Storage Modifier to Regulate the Oxygen Redox Reactions in Sodium-Deficient Three-Layered Oxides", Batteries 2022, 8, 56.

<https://doi.org/10.3390/batteries8060056> (IF = 5.938 за 2022 г.).

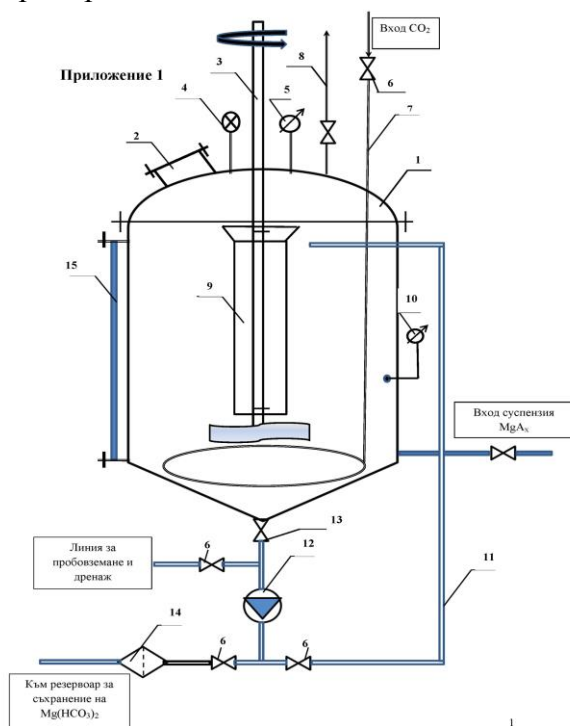
Статията е с отворен достъп на следния адрес: <https://www.mdpi.com/2313-0105/8/6/56>

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение в ИОНХ

ПРОЦЕС И РЕАКТОР ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА МАГНЕЗИЕВ ХИДРОГЕН КАРБОНАТ

Магнезий, калций, калий и натрий са четирите най-важни елемента за метаболизма в човешкия организъм. Консумацията на алкални бикарбонати води до понижаване на костната резорбция и до увеличаване на скоростта на костно образуване. За съжаление, когато се консумират в продължителен период, независимо от дозата, натриевият и калциевият бикарбонати влияят токсично. Установено е, че тяхна по-безопасна алтернатива е магнезиевият бикарбонат. Освен това, дефицитът на магнезий в организма е свързан с редица клинични прояви. Най-лесно усвояемата форма за допълване на дневната необходима доза, освен чрез храната, е чрез вода, обогатена с водоразтворимата форма на магнезия - магнезиев хидроген карбонат.

Разработката предлага процес и реактор за получаване на магнезиев хидроген карбонат, водоразтворима форма с приложения в хранително-вкусовата промишленост, козметиката, фармацевтиката и медицината. Процесът се състои в смесване на водна суспензия от слабо разтворимо магнезиево съединение (хидроксид, оксид или карбонат) с въглероден диоксид. Реакторът представлява система за: барбутиране, механично смесване, рециркулация и контролно-измервателни прибори. Инсталацията осигурява оптимални условия за провеждане на химичната реакция с висока скорост, водеща до получаване на стабилна форма на магнезиев хидроген карбонат за кратко време и нисък разход на енергия. Методът дава възможност за контролирано получаване на воден разтвор на магнезиев хидроген карбонат, както и на смесени разтвори от него, съдържащи полезни за човешкото здраве микроелементи, като литий, бор и др.



Принципна схема на реактора за получаване на магнезиев хидроген карбонат:

- 1- Реактор-абсорбер;
- 2- Люк;
- 3- Механична бъркалка;
- 4- Предпазен клапан;
- 5- Манометър;
- 6- Кран;
- 7- Барботьор;
- 8- Изход CO₂;
- 9- Кавитатор;
- 10- рН метър с периодично действие;
- 11- Линия за рециркулация на реакционната смес;
- 12- Центробежна помпа;
- 13- Шибер;
- 14- Механичен правоточен филтър;
- 15- Нивоказател

Ръководител: доц. д-р Иван Узунов

Подадена заявка за патент на изобретение с № 113503, “ Процес и реактор за получаване на магнезиев хидроген карбонат“, заявител ИОНХ:

Реализиран в изпълнение на Националната научна програма „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“, Реш. МС# 577/17.08.2018

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ИОНХ

Международното сътрудничество на ИОНХ през 2022 г. се изразява в успешното изпълнение на проект TwinTeam, финансиран от МОН по ННП „Европейски научни мрежи“ 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 към центъра на Испанския съвет за научни изследвания и Университета на гр. Севиля (Испания). По-важните резултати са:

а) Организиран и проведен бе **международен обучителен семинар „Методи и материали за чисти технологии“ (MetMat2022)**, в град Сандански (7-10.09.2022 г.). На семинара бяха изнесени 8 пленарни лекции от чуждестранни учени, 2 фирмени презентации и 48 доклада. Комисия в състав от видни български учени определи три награди „за най-добър постер“ по всяка тематика за трима млади учени.

б) Публикувана е **книжка “Size-Dependent Effects” към международното научно списание “Materials Today: Proceedings”** (SJR=0.36, indexed in SCOPUS database), издавано от утвърденото научно издателство Elsevier, която съдържа **18 публикации** по съответните тематика, като една от тях с участието на учени от партньорската организация (Институт по материалознание в гр. Севиля) е под формата „свободен достъп“. Всички статии са рецензирани от поне двама независими международни рецензенти, следвайки практиката на издателство Elsevier.

в) През годината бяха реализирани 15 командировки на учени от ИОНХ за обучение в партньорските организации в Англия, Германия, Испания и Гърция.

г) Резултатите по проекта бяха представени на две международни конференции.

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, при провеждане на научни изследвания и публикуване в сътрудничество с чуждестранни учени.

През 2022 г. продължи изпълнението на проект по двустранна спогодба на ФНИ с Университет по технологии, Департамент по инженерна механика в гр. Далян, КНР по тема „Електродни материали на основата на съединения на преходните метали за литиево-йонна батерия“ (ИОНХ е водеща организация). Стартира изпълнението на три нови междуакадемични договори в ИОНХ: с Египетската Академия за Научни Изследвания и Технологии (ЕАНИТ) по тема „Текстилни изделия, функционализирани с метал-органични структури (MOF) притежаващи UV-защита, антимикробни и противокомарни свойства“; с Център за изследване на енергията в Будапеща, Унгария на тема „Синтез и структура на цинково-бисмут-боратни стъкла, модифицирани с волфрам“; с ТЮБИТАК (Университет Muğla Sıtkı Koçman, Турция) на тема „Изследване на многокомпонентни АВ сплави на базата на Mg за съхранение на водород, както в газова фаза, така и електрохимично“. 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.

Чуждестранен учен Prof. Dr. Prabeer Varpanda посети ИОНХ през 2022 г. и изнесе лекция пред Колоквиума на ИОНХ на тема „Fluorophosphate class of polyanionic battery insertion materials“.

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, Университет Ибн Тофаил, Мароко, Департамент по химия към Университет Мохамед Първи, Мароко и др. В резултат на международното сътрудничество, което ИОНХ поддържа, 29 % 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, необходима апаратура (максимално добра за условията в България), има опит и традиции. ИОНХ е акредитиран (до 2027 г.) да подготвя докторанти по 5 докторски програми – неорганична химия, химия на твърдото тяло, химична кинетика и катализ, аналитична химия и теоретична химия. В центъра за обучение на БАН, учени от ИОНХ предлагат 7 специализирани курса (до 2026 г.) и през 2022 г. са проведени 4 курса по Неорганична кристалохимия и рентгеноструктурен анализ, 1 курс по Спектроскопски методи за анализ на повърхността и обема на материалите и 1 курс по Методи за синтез на неорганични материали.

През 2022 г., **един докторант**, задочна форма на обучение успешно защити дисертационния си труд по докторска програма „Аналитична химия“. Дисертационният труд е на тема „Аналитично охарактеризиране на природни материали и изследването им като биосорбенти за пречистване на води“ (Лидия Иванова). Двама докторанти на самостоятелна подготовка по докторски програми „Теоретична химия“ (Нина Стоянова-Нанкова) и “Неорганична химия“ (Антонина Ковачева) са отчислени с право на защита. Други двама отчислени докторанти са в подготовка на защита на дисертационен труд.

През 2022 г. двама докторанти във ФХФ-СУ и ИЕЕС-БАН са защитили успешно докторските си дисертации под съръководството на проф. Р. Стоянова от ИОНХ. Хабилитирани учени от Института са съръководители на 2 докторантури в други научни организации – ИЕЕС и ИЕ-БАН.

ИОНХ създава отлични условия за развитие на научния потенциал на младите учени. В подкрепа на това, от 13 докторанта, защитили дисертации в периода 2016-2022 г., 11 от тях продължават научната си кариера в ИОНХ, усъвършенстват работа си със специализирана апаратура, участват активно в научни проекти на Института. Активната научна работа на младите учени по проекти допринася за развитието им като специалисти и за успешното им интегриране в европейското изследователско пространство. Двама млади учени от ИОНХ изпълняват проекти по Конкурс за финансиране на Фундаментални научни изследвания на млади учени и постдокторанти към ФНИ, като единият от тях е спечелен през 2022 г. Млад учен от ИОНХ се включи с проект в подновената Национална програма „Млади учени и постдокторанти-2“ към МОН, модул Млади учени. Осем млади специалисти са привлечени за работа по

проекти Вихрен. Един учен се е обучавал в Университет на Севиля по програмата за научен обмен Еразъм+.

През 2022 г. ИОНХ се включи активно в Проект BG05M2OP001-2.013-0001 на МОН „Студентски практики – Фаза 2” финансиран от ОП НОИР, в рамките на който бяха проведени 20 студентски практики за студенти от ХТМУ, СУ (ФХФ и ФзФ) и Лесотехническият университет. Някои от тях са постъпили на работа в ИОНХ.

През 2022 г., бяха проведени учебни практики за ученици от частното училище „Свети Георги“ в рамките на 40 часа.

http://www.igic.bas.bg/rushmore_event/успешно-приключи-ученическата-практика/

Проект „Проучване на качеството на водата и седиментите в Силистренския сектор на река Дунав“ на Мохаммад-Мурад Рашад Халвани, разработен в Лабораторията «Солеви системи и природни ресурси» спечели първа награда от Ученическият институт на БАН. Участникът е ученик от 12 клас в Езикова гимназия "Пејо Яворов" Силистра, член на Екоклуб "Пеликан" към ЦПЛР - Обединен детски комплекс Силистра.

Учени от ИОНХ са участвали в 5 изпитни комисии по конкурс за академична длъжност „главен асистент”. ИОНХ създава благоприятна среда за кариерно развитие на утвърдили се учени и през 2022 г успешно бяха проведени един конкурс за академичната длъжност „професор“, три конкурса за „главен асистент“ и един за „асистент“.

През 2022 г. в рамките на проекта TwinTeam, четири групи учени реализираха работни посещения в партньорските организации в Германия, Великобритания, Испания и Гърция с цел създаване на научни сътрудничества, научен обмен и обучение по приоритетни теми.

За поредна година е проведен четиридневен семинар (в гр. Шумен) за обучение на членовете на лабораторията «Солеви системи и природни ресурси» от София и Бургас (производствена база), финансиран от Вътрешен договор партия „Ръководител договор”.

Един от конкурсите за редовна форма бе трансформиран в задочна форма на обучение и на него се яви кандидат, който го спечели. Така че, от 1.01.2023 г. е зачислен в задочна форма на обучение.

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;

➤ Съвместната иновационна дейност на ИОНХ през 2022 г. с външни организации и партньори, вкл. поръчана и договорирана с фирми от страната и чужбина, 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. Тя включва разработка на продукти и технологии на медицинска натурална козметика, производство и продажба по поръчки от фирми на продукти под три търговски марки: **Black Sea Stars**, която е и международна, и две национални - **Sea Stars** и **Solilig**. Понастоящем се разработват и са в продажба около 200 продукта. През годината са разработени и нотифицирани **15 нови** козметични продукти по поръчки на бизнеса и са сключени **2 нови договора с партньори от Англия и Германия и 2 договора с партньори от България**. Основни клиенти в страната са: "РЕЛАКС БИ" ЕООД; "БИОСПЕР" ЕООД; "БЛЯК СИЙ СТАРС" ЕООД; "КРЕМ КОМФОРТ" ООД; "АГЕНЦИЯ БИК" ЕАД; "НЮ ГРИЙНЪРИ" ЕООД, "БЕЛАНН" ЕООД, "БИОНТРА" ЕООД; "ЛУГЕСТИКА" ЕООД, "КОНТЕСА БГ" ЕООД, "Козметикс България Профешънъл" ЕООД, "ВИДЕНОВИ КО" ООД,

“АГЕНЦИЯ БИК” ЕАД, и в чужбина: Vengard UK Ltd – Англия, Германия. Многобройни спа-центрове в страната ползват произвежданите от ССПР-Бургас продукти с черноморска луга. През годината е реализирана продажба на наши продукти на обща стойност 733 964 лв (с ДДС).

Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“-София и -Бургас 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, организирани на малки производства и проучване на пазара.

➤ Проведени са изследвания в различен мащаб върху нови и утвърдени в практиката катализатори за работа в системи за опазване на околната среда, производство на фирмата Халдор Топсо (Дания). В лабораторни условия са реализирани експерименти при условия, максимално доближаващи тези в практиката, основно по отношение на съдържание на водни пари и серен оксид. Разработват се модели, описващи процесите на пълно окисление на летливи органични съединения в отпадни газове.

➤ През 2022 г. е заявено ново изобретение „Процес и реактор за получаване на магнезиев хидроген карбонат“ от доц. д-р Иван Узунов, реализиран по проект на Националната научна програма „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“, а други две изобретения със заявител ИОНХ-БАН са все още в експертиза. Активни са 6 патента, 3 търговски марки и 3 полезни модела (от тях ИОНХ е притежател на два патента и един полезен модел).

➤ ИОНХ има сключен договор (2021-2023) с Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас за провеждане на анализи и количествено определяне на химичен състав.

➤ През 2022 г. са подписани споразумения с фирмите Cabot и Graphit Kropfmühl GmbH, за тестване на въглеродни материали като аноди за натриево-йонни батерии при стайна и повишена температура.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ

6.1. ССПР-Бургас поддържа сградния фонд на базата на Института в Бургас. През годината са ремонтирани изцяло две помещения, на които бяха нанесени сериозни щети от урагана през лятото. Ремонтът е извършен изцяло със собствен труд и материали за около 10 000 лв. Създадена е нова WEB страница на Проект Black Sea Stars, <http://blackseastars.bg/>. Финансирането е от средствата от продажбата на готови продукти.

По договор с международна фирма Халдор Топсо-Дания са получени **118038 лв.**

Приходи от извършени анализи в областта на неорганичната химия- фотоелектронни, рентгенови, ИЧ, ТЕМ, ЕПР, ДТА и др. анализи, са **53807 лв.** Извършени са анализи на фирми от страната: Булгартрансгаз ЕАД, Сика България, МарсАрмор ООД, Чайка

фарма, Сенсата технолоджи ООД, Техкерамик М АД, Калцит АД – Асеновград, Солво Трейд ООД, МЦ Уроелит, ЛЕМ БГ ЕООД; STOPOD INVEST HOLDING EAD. Основни клиенти са и институти на БАН, НИС-СУ, ХТМУ.

6.2. ИОНХ има 1 действащ договор за отдаване под наем на площ от 1 кв.м. от фойайето на 3 етаж за кафе-машина с фирма „Елиди 2008“ ЕООД (779 лв.).

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ИОНХ

През 2022 г. приходите на ИОНХ се формират от:

- Бюджетна субсидия **2930742 лв.**

(за работна заплата 2129117 лв., 72.6 %)

Издържка 824224 лв.

Допълнителни възнаграждения – 754706 лв.

Разлика между получени и предоставени средства 1190968 лв

Получени 1247179 лв.

Трансфери от ФНИ 891204 лв.

ИФХ-БАН 56800 лв

ИЕ-БАН 7500 лв.

БАН-Администрация 71415 лв.

ИОХЦФ 27000 лв.

ИФХ 28000 лв.

ИЕЕС 114000 лв.

от БАН-Администрация 51260 лв.

Предоставени: 56211 лв.

СУ 45881 лв.

ИЕ-БАН 809 лв.

ИК-БАН 2519 лв

БАН-АДМ. 5952 лв

ИМСТЦХ-БАН 616 лв.

БАН-Адм. 434 лв.

Собствени приходи 906588

- приходи от продажба на продукцията (с ДДС) 733964

- приходи от извършени анализи 53807

- договори с чуждестранни фирми (Халдор Топсо-Дания) 118038

- Елиди 2008“ ЕООД 779

През 2022 г. ИОНХ е получил бюджетна субсидия в размер на **2930742** лв. и има привлечени средства в размер на **2097556** лв. Общо бюджетната субсидия и собствени приходи формират бюджет от **5028298** лв. и съотношението на собствените средства към тези на бюджетната субсидия. е **41.7 % към 58.3 %**.

По бюджетна субсидия, средната месечна брутна работна заплата за 2022 г. е **1628** лв. (по план 1600 лв.). За сравнение, тя е по-висока от миналогодишната средна месечна заплата (1395 лв.) с ~17 %. Благодарение на участието в мащабни проекти стана възможно през 2022 г. да бъдат изплащани и допълнителни трудови възнаграждения в размер на 754706 лв.: за нещатен персонал; по граждански договори (50616 лв.); за допълнителни трудови възнаграждения по договори (674982 лв.), обезщетения по чл.222 и чл.224. При средно допълнително заплащане от 555 лв., трудовите възнаграждения възлизат на 2183 лв. За сравнение според Националния статистически институт, средната брутна работна заплата за третото тримесечие в сектор професионални дейности и научни изследвания е 2379 лв., сектор образование - 1809 лв., за София-столица е 2390 лв., т.е. трудовите доходи на персонала в ИОНХ (бюджетно и допълнително) за 2022 г. доближават тези за София.

Плановата численост на ИОНХ-БАН към 31.12.2022 е 125 щатни бройки, незаети 16 бройки.

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	професор Теоретична химия	Теоретична химия Неорганична химия	ИОНХ-БАН
10	Диана Тодорова Рабаджиева	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ-БАН
11	Кристина Костова Чакърва	д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
12	Красимир Любенов Костов	д-р Химия на твърдото тяло	доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Физикохимия Химична кинетика и катализ	ИОНХ-БАН
13	Иванка Петрова Спасова	д-р Химична кинетика и катализ	професор 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	ХФ-СУ

				Физикохимия Неорганична химия	
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 № 54/2022 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 2022 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
ФФ-МУ	Факултет по фармация на Медицински университет
ТУ	Технически университет
СУ	Софийски университет
ПУ	Пловдивски университет
ИЕ	Институт по електроника
ГИ	Геологически институт
ИОМТ	Институт по оптически материали и технологии
ИКИТ	Институт за космически изследвания и технологии
ФДМ - МУ	Факултет по дентална медицина – Медицински университет
ИФТТ	Институт по физика на твърдото тяло
САН	Сръбска академия на науките
ЦЛ СЕНЕИ	Централната лаборатория по слънчева енергия и нови енергийни източници
ЕПР	Електронен Парамагнитен Резонанс
ТЕМ	Трансмисионна електронна микроскопия
XPS	X-ray photoelectron spectroscopy
FAAS	Flame Atomic Absorption Spectroscopy
TXRF	Total reflection X-rays fluorescence
ИИМ	Интерметалиди и интеркалационни материали
XAS	X-ray absorption spectroscopy
XRD	X-ray Powder Diffraction



Международна научна конференция MetMat2022 “Training Workshop on Methods and Materials for Clean Technologies” 7-10 септември 2022 г. в гр. Сандански. 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).