



**ОТЧЕТЕН ДОКЛАД**  
**на ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ**  
**за 2024 г.**

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

**януари 2025 г.**

# 1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ИОНХ

## 1.1. Преглед на изпълнението на целите на ИОНХ

Институтът по обща и неорганична химия на БАН (ИОНХ) провежда фундаментални и приложни научни изследвания в областта на неорганичното материалознание. Институтът води устойчива **научноизследователска политика** изпълнявайки специфичните цели и задачи съгласно разработените Национална стратегия за развитие на научните изследвания (НСРНИ) за периода 2018-2030 г., Стратегията за развитие на Института за периода 2018-2025 г., както и Научно-изследователския план на ИОНХ за 2021-2024 г. През 2024 г. научно-изследователската дейност на ИОНХ включваше изпълнението на следните теми: Тема А. Синтез, структура и дизайн на материали за екоенергийни, оптични и биомедицински технологии; Тема Б. Материали и процеси за опазване на околната среда и борба с климатичните промени; Тема В. Оползотворяване на природни ресурси и екологичен мониторинг; Тема Г. Нови подходи за инструментален и теоретичен анализ на материали.

Научно-изследователската дейност в Института се финансира от изпълнението на различни проекти към ФНИ, ОП-НОИР, МОН (Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“), Национална пътна карта (НПК), Национални научни програми (ННП), Националния център за върхови научни постижения „Мехатроника и чисти технологии“, както и от иновативна дейност. В резултат на активната проектна дейност ИОНХ има за 2024 г. **123 публикации** и **3940 цитата**, отразени в международните бази данни (WoS и/или Scopus).

През 2024 г. ИОНХ продължи да развива **приложни и иновационни изследвания**, свързани основно с оползотворяване на природни ресурси. Разработени са и внедрени седем нови козметични продукта от Лабораторията „Солеви системи и природни ресурси“ - Бургас, ИОНХ. Институтът развива иновативна дейност с международната фирма „Кабот“ върху въглеродни материали като аноди за натриево-йонни батерии, както и с фирма „Халдор Топсо“, Дания свързана с разработване на паладий-съдържащи катализатори, за очистване на летливи органични съединения в отпадни газове. Извършени са и сервизни анализи, консултации и експертизи за нуждите на 23 фирми и организации.

**Научната инфраструктура в Института** продължи да се обновява. През 2024 г. бе спечелен нов проект *„Подобряване на условията на труд и модернизирание на инфраструктурата за научноизследователска и иновационна дейност в ИОНХ-БАН“* (ИНФРА-ИОНХ) в рамките на Плана за възстановяване и устойчивост (ПВУ), който е част от инструмента „Следващо поколение ЕС“ (2021-2024 г.). В рамките на проекта ИнфраМат от Националната пътна карта за развитие на научната инфраструктура бе закупен нов комбиниран диференциално сканиращ калориметър и диференциално термичен анализ с термогравиметрия и масспектрометър, както и контактен дилатометър за определяне на линейно термично разширение. По проекти към ФНИ бяха закупени и инсталирани малки специфични научни апаратури.

През 2024 г. ИОНХ проведе активна политика за **развитие на кадровия състав**. Привлечени бяха шест нови млади химици, проведени бяха конкурси за академичните длъжности „главен асистент“ (**5 бр.**) и „асистент“ (**9 бр.**). По Инвестиция С2.12 „Повишаване на иновационния капацитет на Българската академия на науките в сферата на зелените и цифровите технологии“ по Плана за възстановяване и устойчивост, бе спечелен и се изпълнява проект „Повишаване на безопасността на натриево - йонните батерии“ SAFEBAT, в рамките на който се обучава един специализант в Института. По Националната програма „Млади учени и постдокторанти“-2 в ИОНХ се изпълняват два проекта – един в модул „Млади учени“ и един

в модул „Пост-докторанти“. През 2024 г. в ИОНХ защитиха двама докторанти, един премина етап на предварителна защита, а един продължава да е в процес на обучение. Нов проект „*Интердисциплинарно обучение за развитие на знания и компетентности на докторанти в различни направления на съвременните изследвания за здравословен живот и чисти технологии (ИНТЕРДОК)*“ бе спечелен и по програма „ОБРАЗОВАНИЕ“ 2021-2027 на МОН.

През 2024 г. нарасна значително **мобилността** на учените: **123** командировки, от които 29 са в чужбина и 94 – в страната за участие в научни форуми и работни срещи. Двама учени са получили стипендия за научен обмен по програмата Еразъм+ и един по стипендиантска програма към TUBITAK, VIDEV. Организиран бе един семинар в рамките на проект CARiM-VIHREN през април 2024 г. в с. Белчин и една творческа работилница по проект „Химия на водно-солеви системи за оползотворяване на природни минерални ресурси и отпадни продукти, в частност морски химически ресурси“, проведена в гр. Казанлък.

**Международната дейност** на ИОНХ се изразява в сътрудничеството с водещи научни организации от Испания, Турция в рамките на Европейския проект M-ERA.NET, както и един нов спечелен проект с Китай към ФНИ. Трима чуждестранни учени посетиха Института през 2024 г. В рамките на междуакадемични договори и споразумения (ЕБР) бяха реализирани два проекта – с Египет и Сърбия.

През 2024 г. ИОНХ участва в **международна редакторска дейност**, резултат от която през месец април излезе от печат книгата (356 стр.) със заглавие Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (<https://www.mdpi.com/books/reprint/9082-size-dependent-effects-in-materials-for-environmental-protection-and-energy-application>), с издателство MDPI. В момента се подготвя второ специално издание със заглавие Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application към списанието Materials.

**Информираността на обществото** за научните постижения на ИОНХ обхваща многобройни и разнообразни обществени изяви, като участие в Наука за бизнес, XIV Софийски фестивал на науката, участие в "Млади посланици на науката", интервюта в БНР, списание „Икономика“, списание „Осем“, списание „Полиграфия“, Дир БГ, и др.

Устойчивите резултати и научни показатели през 2024 г. утвърждават ИОНХ като водещ национален изследователски и иновационен център по химия на материали и процеси с екологична насоченост. Най-яркото независимо доказателство за това е класирането на ИОНХ на шесто място във водещата група **Scientific potential leaders**, съгласно класацията **National H-index Ranking** за 2024 г. от всички институти и висши училища в България (общо 152). В допълнение четирима учени на основен трудов договор в ИОНХ – акад. дхн К. Хаджииванов (Физикохимия), проф. д-р Р. Стоянова (Енергия), проф. д-р Е. Жечева (Енергия) и д-р Вера Бутова (Неорганична химия) са сред първите 2% от милиони учени по света в съответните тематични области в класацията на Станфордския университет за 2024 г.

## **1.2. Изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017-2030**

**ТЕМАТИКА НА ИОНХ И НСРНИ:** ИОНХ работи активно за справяне с глобалните предизвикателства, свързани с изменението на климата, съхранението на енергия и подобряване на условията на живот, което е и в изпълнение на една от приоритетните тематични области на Иновационната стратегия за интелигентна специализация ИСИС 2021-2027 „*Чисти технологии, кръгова и нисковъглеродна икономика*“. Тя се разглежда като *хоризонтална и приоритетна област на интелигентна специализация на страната за всичките ѝ административни области* (т.е. 28 области на страната на ниво NUTs III). В тази връзка ИОНХ е водеща организация в създаването на **Национален център за върхови**

постижения „Мехатроника и чисти технологии“. През 2024 г. бяха успешно подадени и одобрени от европейската комисия (JASPERS) документите за Националния център за върхови научни постижения „Мехатроника и чисти технологии“. Документи бяха подадени и към Изпълнителната агенция "Програма за образование" за одобрение с входящ регистрационен номер BG16RFPR002-1.014-0006 по Програма "Научни изследвания, иновации и дигитализация за интелигентна трансформация". В началото на 2025 г. се очаква решение на Управляващия орган за финансиране на втория етап. През 2025 г. се очаква одобрение и стартиране на **Национален Център по компетентност** „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил), в който ИОНХ участва като партньор.

**МЕЖДУНАРОДНА АКТИВНОСТ НА ИОНХ И НСРНИ:** 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 успешно продължава да изпълнява Европейския проект по програма M-ERA.NET с водеща организация ИОНХ-БАН и ръководител проф. Р. Стоянова (КП-06-Д002/3 от 18.5.2023 г.). Партньори по проекта са колегите от Университет на град Кордоба, Испания, Университет Инону-Малатя, Турция и TÜBİTAK Институт за железопътни транспортни технологии (Тюбитак-Руте), Турция.

**НАУЧНА ПОЛИТИКА НА ИОНХ И НСРНИ:** По отношение на **Дейност 4.2.** Развитие на националната пътна карта за научна инфраструктура и активно участие в Европейската карта за научна инфраструктура, заложен в НСРНИ в РБ, в ИОНХ се изпълняват **два научни инфраструктурни проекта** по национална пътна карта (партньор): ИНФРАМАТ (2018-2024) „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-ECCSEL (2018-2024) „Съхранение на енергия и водородна енергетика“ за обновяване, разширяване и поддържане на научната апаратура в ИОНХ. С помощта на финансовите средства по ИНФРАМАТ се поддържа функционирането на част от апаратите в ИОНХ: напр. профилактика и ремонт на апаратите и заплащане на годишни абонаменти за поддръжка на наличната апаратура. В изпълнение на задачите на ИНФРАМАТ участват 18 опитни изследователи и 2-ма специалисти. В НИ СЕВЕ ИОНХ-БАН участва в Направление 1 „Батерии“. Това позволява да се поддържа оборудването включено в инфраструктурата (закупени са компоненти, консумативи, резервни части, материали и извършени ремонти) и да се провеждат съответните измервания по изпълнение на проектните дейности. В изпълнение на задачите на НИ СЕВЕ участват 13 опитни изследователи и 2-ма специалисти. Общият брой на сервизните услуги за 2024 г. е 19.

**ПРОЕКТНА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ И НСРНИ:** През 2024 г. в ИОНХ се изпълняваха **три национални научни програми** към МОН в съответствие с основната им цел *създаване на условия за търсене и намиране на решения на актуални и значими обществени предизвикателства, свързани с екологични, технологични, и др. въпроси и проблеми, както и със стимулирането на младите учени в страната:*

1. „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)“. Програмата беше удължена до края на 2024 г.

2. „Млади учени и постдокторанти“- 2 проекта на ИОНХ в Модул „Млади учени“ на тема „Алкални и алкалоземни метални комплекси на 2-карбамидо-1,3-индандион с приложение за

фотопротектори и биомаркери“ (гл. ас. д-р Нина Стоянова-Нанкова), а в Модул „Постдокторанти“ на тема „Неутрални комплекси на манган (II) халогениди с трифенилфосфинов лиганд“ (гл. ас. д-р Мартин Недялков).

3. „Стимулиране на публикационната активност в авторитетни международни научни списания и отворения достъп до научна информация“ бенефициент БАН. През 2024 г. по тази програма, допълнително финансово стимулиране са получили 52 учени и специалисти от ИОНХ за публикувани статии за 2022 г. в списания с квартал Q1 и Q2.

В ИОНХ се изпълняват два проекта по ННП „**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: 1) „Синергизъм между катионни и анионни редокс реакции при материали с колосален интеркалационен капацитет“ (CARiM), ръководител проф. д-р Р. Стоянова, Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“ и 2) „Advanced Isotopic Labelling for Identification of AB<sub>n</sub> Surface Structure“ (Adonis), ръководител акад. К. Хаджииванов, Лаборатория "Реактивност на твърди повърхности". В рамките на проект CARiM-VIHREN през април 2024 г. бе проведен в с. Белчин тридневен работен семинар.

През 2024 г. в Института се изпълняваха **21 научни проекта по Фонд „Научни изследвания“ – МОН**, свързани с фундаментални изследвания по приоритетни теми заложи в НСРНИ в РБ и на ИСИС. Пет от тези проекти са нови за ИОНХ. В **14** проекта, **ИОНХ е водеща организация**. Учени от ИОНХ са включени с лично участие в проекти на ФНИ (3) и в други проекти (12).

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

**Националните програми и проекти в ИОНХ** осигурява: обучение, развитие и финансови стимули на висококвалифицирани специалисти, осигуряване на висока компетентност и оборудване за подпомагане на високотехнологични производства и бизнеса, партньорство с други сектори 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.

**ИНОВАЦИОНЕН КАПАЦИТЕТ НА ИОНХ И НСРНИ:** В изпълнение на инвестиция С2.12 „Повишаване на иновационния капацитет на Българската академия на науките в сферата на зелените и цифровите технологии“, в процедурата BG-RRP-2.015 Укрепване на изследователския потенциал чрез привличане и задържане на талантиливи изследователи по Плана за възстановяване и устойчивост, от ИОНХ бе спечелен 1 проект на тема „Повишаване на безопасността на натриево - йонните батерии“.

В съответствие с Политика 4.6. „Стимулиране на приложни научни изследвания“, приложните изследвания в ИОНХ са свързани основно с оползотворяване на природни ресурси, в частност морска луга и разработване на технологии за производство на козметика и медицинска козметика в Лабораторията ССПР-Бургас на ИОНХ-БАН. Дейността се осъществява в рамките на Вътрешен договор, свързан с разработване и производство на продукти.

**НАУЧЕН ПОТЕНЦИАЛ НА ИОНХ И НСРНИ.** В съответствие с Дейност 1.3. от НСРНИ „Повишаване квалификацията на учените в научните организации и висшите училища“, значителна част от активностите в ИОНХ са насочени към развитието на научния потенциал и поддържане на високо научно ниво на изследванията. През 2024 г., са назначени шест млади химици, 15 млади специалисти и учени работят на щатна позиция и 8 привлечени млади учени

изпълняват проекти „Вихрен“. В рамките на компонента 2 от бюджета на ИОНХ се извършва допълнително диференцирано заплащане на учените в ИОНХ, обвързано с постигнати резултати. Осигуряват се финансови стимули за привличане на повече млади хора към докторантура и пост-докторантура. Нов проект „*Интердисциплинарно обучение за развитие на знания и компетентности на докторанти в различни направления на съвременните изследвания за здравословен живот и чисти технологии (ИНТЕРДОК)*“ бе спечелен и по програма „ОБРАЗОВАНИЕ“ 2021-2027, в който Института участва като партньор. Водеща организация е СУ „Св. Климент Охридски“ (Факултет по Химия и фармация и Биологически факултет) а втори партньор е ШУ „Епископ Константин Преславски“.

През 2024 г. бе спечелен нов проект „*Подобряване на условията на труд и модернизиране на инфраструктурата за научноизследователска и иновационна дейност в ИОНХ-БАН*“ (ИНФРА-ИОНХ) в рамките на Плана за възстановяване и устойчивост (ПВУ), който е част от инструмента „Следващо поколение ЕС“ (2021-2024 г.).

**НОРМАТИВНА УРЕДБА НА ИОНХ И НСРНИ.** Съгласно хоризонтална дейност 2. *Синхронизирани изменения в нормативните актове, свързани с изпълнението на стратегията*, през 2024 г. в ИОНХ са актуализирани Правилник за атестиране на служителите на ИОНХ (актуализиран 13.06.24), Правилник за управление на права от интелектуална собственост в ИОНХ (актуализиран 18.04.2024), Правила за достъп на потребители до научната инфраструктура на ИОНХ (актуализиран 18.04.2024) и Правилник за вътрешния трудов ред на ИОНХ (актуализиран 19.02.2024).

### **1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности**

Ползата за обществото от научноприложните и иновационни дейности на ИОНХ през 2024 г. може да се раздели на няколко групи:

#### ***а) Сътрудничество на ИОНХ с бизнеса, организации и общини***

- В полза на обществото ИОНХ извършва *дейности насочени към опазването на околната среда*. През 2024 г. са разработени и нотифицирани седем нови козметични продукта. Популяризирането на продуктите, нужни за бизнеса в сферата на спа, уелнес и физиотерапията, както и ползата от сътрудничеството между науката и бизнеса е представено в интервюта на колеги от Лаборатория ССПР пред списание „Икономика“.

- В рамките на договор между община Поморие и ИОНХ са извършени многобройни изследвания на Поморийското езеро с цел оценка на неговото състояние. 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.

- ИОНХ извършва редица дейности, свързани с обслужването на фирми и организации: сервизни анализи, консултации и експертизи за подпомагане технологичната дейност на малки и средни предприятия в страната. Комбинирани анализи от рентгенофазов анализ и рентгенов флуоресцентен анализ е извършен по поръчка от няколко фирми - "Хитачи България", Севлиево (индустриални проби), "Проген ООД" (индустриални проби), "Ронис ЕООД" (отпадъци от минната промишленост), "Incolab Services" (внос промишлени суровини). Редица фирми - ЕМКО-ООД, ТИВЕКС-България ООД, Барит Майнинг ЕООД са потърсили експертиза от ИОНХ за анализ на материали с прахова рентгенова дифрактометрия. За измерване на специфична повърхност на различни катализатори са заявили анализи в ИОНХ фирмите - Комбинат за цветни метали (КЦМ), Пловдив и Монди – гр. Стамболийски. За определяне на термичната стабилност на различни проби чрез ДТА/ТГ апарат са измерени образци на следните фирми - VAL Technology ЕООД. Фирмите МИКРОАК ЕООД, Ен Енд Кей

Козметикс Дивелопмънтс ООД, Сика България, Ронис ЕООД, Хамбергер България“ ЕООД са потърсили анализ с пламъкова атомноабсорбционна спектрометрия.

**б) Връзка на научната дейност на ИОНХ с широката общественост**

ИОНХ се включи във форума „Наука за бизнес“ 4, който е съвместна инициатива на БАН и Изпълнителната агенция за насърчаване на малките и средните предприятия с подкрепата на МОН и Министерството на икономиката. Група от учени на ИОНХ представиха щанд, на който бяха изложени материали и продукти, разработени в Института. С три устни доклада са представени постиженията в ИОНХ, насочени към бизнеса от страната и чужбина с цел установяване на контакти: „Получаване на огнеупорни мулитови керамични изделия с помощта на 3D принтиране“, гл. ас. Н. Маринков и „Материали за обезвреждане на парникови газове“, доц. Р. Велинова, „Метод за рециклиране на отпадък от фармацевтичната промишленост“, доц. д-р И. Узунов.

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

- ✓ Участие на ИОНХ в XIV Софийски фестивал на науката, с работилница, „Необятният свят на стъклото“ (доц. д-р М. Калъпсъзова, доц. д-р Р. Велинова, К. Тумбалова, гл. ас. д-р Л. Иванова, гл. ас. д-р Н. Маринков, Г. Бурдина, гл. ас. д-р Цв. Лазарова-Кюлева, гл. ас. д-р М. Недялков), щанд „Иновации и технологии за по-добър живот“ (доц. д-р М. Ганчева, доц. д-р Р. Велинова, К. Тумбалова) и изложба „Химичните елементи през погледа на техните съединения“ (гл. ас. д-р М. Недялков), 11.05.2024г.;
- ✓ Участие на ИОНХ във фестивала "Млади посланици на науката", с щанд „В света на химичните елементи“ (К. Тумбалова, гл. ас. д-р М. Недялков). На тези форуми, научната дейност на ИОНХ е представена под формата на постери, брошури, демонстрации и експерименти, <https://beautifulscience.bg/sofia-science-festival/>, 27.09.2024 г.
- ✓ Интервю с доц. д-р Стефка Тепавичарова, „Сами произвеждаме продукти с морска луга и кал“, списание "Икономика", 22.09.2024;
- ✓ Интервю с проф. д-р Диана Рабаджиева, „Дайте ни проблеми и ние ще им намерим решение“, списание“, "Икономика", 15.09.2024;
- ✓ Интервю на доц. д-р Иван Узунов, „Рециклиране на блистери с бонус – водород в промишлени количества“, интервю пред ДИР БГ, 17.08.2024 г.;
- ✓ Участие в интервю на доц. д-р Иван Узунов, „Раят на земята“, Списание Осем, март, 2024, стр. 32-37;
- ✓ Участие в научнопопулярна статия на проф. д-р Диана Рабаджиева, „Качества на националните водни ресурси (повърхностни и подземни). ННП „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“ – Резултати и постижения, АЗ БУКИ, м. декември, 2024
- ✓ Интервю на Катерина Тумбалова, „Еврика! Успешни българи“, Интервю пред БНР, 12.08.2024 г.;
- ✓ Интервю на гл. ас. д-р Николай Маринков за сп. „Полиграфия“, „Изработка на огнеупорни мулитови керамични изделия с иновативен композит по метода на 3D технологията“, м. октомври, 2024 г.
- ✓ Доклад на гл. ас. д-р София Славова на Втори Пловдивски фестивал на науката, 29.11.2024 г.;
- ✓ Ден на дарителя в музей „Земята и хората“ – получено Свидетелство за дарение на

ИОНХ № 2024-32;

- ✓ Участие в комисия по оценка и защита на постерни презентации Национален ученически конкурс "Празник на химията 2024", гл. ас. д-р Цв. Захариев;
- ✓ Демонстрации във „Вечер на химията“, Климентови дни във Факултета по химия и фармация 20-21 ноември, 2024 г., гл. ас. д-р М. Недялков;
- ✓ Създаден е един документален филма за „Методична лаборатория по атомна спектроскопия“ ([https://www.youtube.com/watch?v=H-d3R\\_OLQkl](https://www.youtube.com/watch?v=H-d3R_OLQkl)).

#### **в) Дейности насочени към личността, привличане и развитие на млади специалисти**

През 2024 г. ИОНХ участва активно и в редица мероприятия свързани с привличането на млади кадри:

- ✓ Ден на кариерното развитие, ФХФ, СУ „Кл. Охридски“, 31.05.2024 г. (проф. д-р И. Георгиева, доц. д-р Д. Манасиева, доц. д-р Е. Иванова, доц. д-р А. Бъчварова-Неделчева). Представянето беше с брошури и филми за научната дейност в Института.
- ✓ Ден на реализацията в рамките на Климентовите дни - ФХФ, СУ „Кл. Охридски“, доклад на тема „Студентски практики и възможна кариера в Институт по обща и неорганична химия - БАН“, 20.11.2024 г., доц. д-р А. Бъчварова-Неделчева.

Двама млади учени, Катерина Гумбалова и Стефани Петрова, са носители на годишните награди на Алма матер за учебната 2023/2024 г. за постижения в научноизследователската дейност. Учен от ИОНХ е получил с кристален приз „The best paper“ за участие в 63-та Научна конференция на РУ&СУ'24 за доклад на тема "Луминесцентни свойства на самариеви и европиеви комплекси с дитиокарбаматен лиганд".

Реализирани бяха и студентски практики, като в рамките на 2 проекта е проведен обучителен стаж за двама студенти от ФХФ – СУ и ХТМУ - София (Георги Василев и Цветелина Герасимова). Със собствени средства на ИОНХ бе реализирано и обучение на един студент (Калина Михайлова) от ФХФ СУ „Св. Климент Охридски“.

И през 2024 г. ИОНХ за пореден път отвори вратите си за ученическата общност: проведена е ученическа практика за ученици от две училища. При посещението им учени от Института презентираха наличната техника и оборудване на учениците, но и нагледно демонстрираха синтез на различни материали.

ИОНХ отбеляза тържествено **90 годишния юбилей** на проф. Христо Баларев. В допълнение, на тържествена церемония, Столична община връчи удостоверението “Почетен гражданин на София” на проф. Баларев.

#### **1.4. Взаимоотношения с други институции**

Взаимоотношенията на ИОНХ с други институции могат да се разделят на две нива - национално и международно ниво:

##### ***а) на национално ниво***

- Учени от ИОНХ си сътрудничат **с университети** в България, основно в направления енергийни ресурси, енергийна ефективност, нанонауки, нови материали и технологии при изпълнение на научни инфраструктурни, национални научни програми и съвместни проекти, но и за извършване на различни анализи. Партньори са следните университети: ФХФ-СУ, ХТМУ-София, Шуменски университет „Епископ Константин Преславски“, Медицински университет – **Плевен**, Факултет по фармация, МУ – **София**, Факултет по дентална медицина, МУ - **София**, МУ-Варна, Университет "проф. д-р Асен Златаров" – **Бургас**, ЮЗУ „Неофит Рилски“, Русенски университет – клон **Разград**. Археологически

музей, гр. **Велики Преслав**. С лично участие 7 учени от ИОНХ са включени в различни проекти на български университети с ФНИ;

- Учени от ИОНХ си сътрудничат с изследователски колективи от **други институти** на БАН - ИК, ИОХЦФ, ИЕЕС, ИП, ИЕ, ИОМТ, ИМК, ИКИТ, ИФХ, ИЕМПА в рамките на различни проекти;
- Израз на ползотворното сътрудничество на ИОНХ с университети и/или Институти на БАН са не само съвместните проекти по различни програми - *Националния център за върхови научни постижения „Мехатроника и чисти технологии; Национален Център по компетентност „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (Хитмобил), Вихрен, ИНТЕРДОК*, но и съвместните публикации в сътрудничество с колеги;
- Учени от ИОНХ участват в експертни органи в областта на **науката и висшето образование**: Научен иновационен съвет по ресурсна ефективност и кръгова икономика, сформиран в изпълнение на инвестиция С212 „Повишаване на иновационния капацитет на Българската академия на науките (БАН) в сферата на зелените и цифровите технологии“ по Компонент 2 „Научни изследвания и иновации“ на Националния план за възстановяване и устойчивост (експерт-консултант, проф. Д. Рабаджиева); Национален комитет към Международния съюз по чиста и приложна химия (членове - проф. д-р Д. Рабаджиева и проф. д-р Р. Стоянова), Жури в конкурс за докторантска стипендия на изявени млади учени на Фондация Карол Знание (член на жури, проф. Р. Стоянова);
- Участие на учени в съвети, комисии и други експертни органи на **външни за БАН институции**: Европейска академия, Комитет за наблюдение на ОП „Наука и образование за интелигентен растеж“ (МОН), Национален съвет за наука и иновации (акад. дхн К. Хаджииванов); Национален координационен съвет по нанотехнологии (доц. И. Стамболова); Експертен съвет в СУНИ към Министерство на иновациите и растежа (доц. д-р Иван Узунов); Обществен съвет на гр. Бургас за опазване на Атанасовско езеро, Консултативен съвет за Поморийското езеро (доц. д-р С. Тепавичарова).
- 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 (член, проф. Д. Ковачева), Управителен съвет на Българско кристалографско дружество (зам.-председател проф. д-р Д. Ковачева, член доц. д-р П. Цветков);
- Рецензии и становища по процедури. Учени от ИОНХ са ценени експерти и през 2024 г. 15 учени са изготвили **29** рецензии и становища по конкурси за научни степени и академични длъжности (2 - за „чл. – кор.“, 1 - „доктор на науките“, 14 - за ОНС „доктор“, 8 - за „доцент“, 3 - за „професор“ и 1 - за дипломни работи) към ИОНХ, ИЕЕС, ИОХЦФ, ХТМУ, ФХФ-СУ, ВТУ „Годор Каблешков“.
- Изготвени са **17** рецензии за проекти на ФНИ и други научни организации в чужбина и **144** анонимни рецензии (от 20 учени) на статии за специализирани списания
- Учени от ИОНХ са членове на редица *национални научни дружества* - Българско кристалографско дружество, Клуб на българските каталиници, 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.

- Учен от ИОНХ е Председател на Българската зеолитна асоциация, член на Управителния съвет на БАН, съветник на Председателя на БАН и член на УС на ЦВП по мехатроника и чисти технологии.

#### **б) на международно ниво**

На международно ниво взаимоотношенията с други институции се изразяват в:

- Участие в международни проекти: Европейски проект M-ERA.NET, международно сътрудничество - БАН и двустранни проекти на ФНИ, като ИОНХ си сътрудничи с водещи научни организации от Испания, Турция, Китай и Египет;
- Участие в експертни органи в областта на науката и висшето образование: Division of Computational and Theoretical Chemistry of European Chemical Society (национален делегат, проф. И. Георгиева); IUPAC Division VI, Chemistry and the Environment (национален представител, проф. Д. Рабаджиева); International Union of Crystallography, Commission on Powder Diffraction (проф. Д. Ковачева);
- Изготвено е 1 становище за ОНС „доктор“ за Университет Лудвиг Максимилиан, гр. Мюнхен;
- Учени от ИОНХ са членове на:
  - *международни научни дружества* - Royal Society of Chemistry, Academia Europea, AcademiaNet, American Chemical Society, Международен съюз за чиста и приложна химия;
  - *Съставителска и редакторска дейност*: отпечатана книга (356 стр.) със заглавие Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application Materials Chemistry SI: Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application-2<sup>nd</sup> Edition (проф. Р. Стоянова, доц. А. Бъчварова, проф. И. Георгиева).
  - *редакционни колегии* - Chemical Engineering Journal (заместник главен редактор), Materials, Academia Environmental Sciences and Sustainability Open Engineering, International Journal of Advances in Chemistry, Recent Patents on Materials Science, Current Smart Materials, Asian Journal of Nanosciences and Materials, Catalysts-MDPI, Science Academique, Frontiers in Chemistry.

### **1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата**

#### **1.5.1. Практически дейности:**

➤ 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. По инициатива на община Бургас Институтът продължава да рекламира уникалните солени езера чрез разработените козметични продукти. По заявка на община Поморие и областната управа на гр. Бургас са извършени изследвания на физикохимичните характеристики (температура, рН, проводимост, соленост и разтворен кислород) на Поморийското езеро с цел да се оцени неговото състояние.

### 1.5.2. Проектите, свързани с общонационални и оперативни дейности, в които ИОНХ участва са:

➤ Проект „Подобряване на условията на труд и модернизиране на инфраструктурата за научноизследователска и иновационна дейност в ИОНХ-БАН“ (ИНФРА-ИОНХ) в рамките на Плана за възстановяване и устойчивост (ПВУ), който е част от инструмента „Следващо поколение ЕС“ (2021-2024 г.);

➤ Проект „Интердисциплинарно обучение за развитие на знания и компетентности на докторанти в различни направления на съвременните изследвания за здравословен живот и чисти технологии (ИНТЕРДОК)“ по програма „ОБРАЗОВАНИЕ“ 2021-2027 към МОН;

➤ 2 проекта в Модул „Млади учени“ на тема „Алкални и алкалоземни метални комплекси на 2-карбамидо-1,3-индандион с приложение за фотопротектори и биомаркери“ (гл. ас. д-р Нина Стоянова-Нанкова), а в Модул „Постдокторанти“ на тема „Неутрални комплекси на манган (II) халогениди с трифенилфосфинов лиганд“ (гл. ас. д-р Мартин Недялков), НП „Млади учени и постдокторанти“.

➤ Дейности по ННП „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“. Работен пакет 3.1 „Качество на националните водни ресурси (повърхностни и подземни)“ - провеждат се изследвания върху оценка на водите на реки преминаващи през големи български градове.

## 2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2024

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 основно от Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“, като при охарактеризирането на материалите са участвали и учени от лабораториите „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“, „Кристалохимия на композитни материали“ и Методична лаборатория по атомна спектроскопия .

➤ Предложен е нов мултиелектронен електрод на основата на полианионно съединение  $\text{NaFeVPO}_4(\text{SO}_4)_2$ , което съчетава в себе си най-разпространените Fe и V йони, имащи разнообразие от окислителни състояния, със стабилна смесена фосфатно-сулфатна матрица. Полианионното съединение е способно да интеркалира обратимо общо 3 мола натрий, което е съпроводено с минимално изменение на обема на кристалната решетка (до 5,2 %). След повърхностно модифициране с редуциран графенов оксид, смесеният фосфато-сулфат показва висок работен капацитет при високи токови натоварвания (около 90 mAh/g при C/2) и отлична циклична стабилност (близка до 99 %) при висока температура, като тези характеристики са едни от най-добрите, съобщени до момента при близки по състав катодни материали. Отличните електрохимични характеристики на повърхностно модифицирания фосфато-сулфат се дължат на специфичния хибриден механизъм на съхранение на натрий.

➤ Чрез *ex-situ* анализи на циклирали фосфато-сулфатни електроди с рентгенова

фотоелектронна спектроскопия и електронен парамагнитен резонанс е установено за първи път формирането на повърхностен филм на интерфейса електрод-електролит, чийто състав и дебелина зависят от потенциала и от температурата, при която протича електрохимичната реакция. Тези резултати дават нови насоки за фин контрол на електрохимичните свойства на полианионни електроди.

- Успешният подход при дизайна на композити между полианионни съединения с въглеродни добавки като редуциран графенов оксид или въглеродни сажди е приложен при разработване на стабилни катодни материали за хибридни литиево-натриево йонни батерии. Сравнителните електрохимични изследвания на двата типа композити позволяват да се изяснят особеностите при реакциите на интеркалация на натрий и литий при висока температура (40 и 60°C).
- Изследвано е влиянието на състава на електролита върху електрохимичното поведение на катодни материали на основата на натриево-железен фосфат пиропосфат,  $\text{Na}_4\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2\text{P}_2\text{O}_7$ , със структура тип НАСИКОН и натриево-железен фосфат,  $\text{Na}_2\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_3$ , с алуаудитна структура. Докато фосфат-пиропосфатния електрод се характеризира с циклична стабилност слабо зависеща от вида на електролитите, то алуаудитния електрод проявява най-добра циклична стабилност в електролит на основата на йонна течност в сравнение с тези на основата на пропилен карбонати и соли натриев хексафлуорофосфат или натриев бис(трифлуорометилсулфонил) имид.
- Съвместно с учени от Турция в рамките на международния проект „MASTER” са разработени електродни материали от типа ядро@обвивка, включващи слоести натриево-желязо-манганов оксиди и  $\text{TiO}_2$ . Електрохимични тестове в потенциостатичен и галваностатичен режим на електродите в натриеви полу-клетки показват, че покритието от  $\text{TiO}_2$  играе решаваща роля за подобряване на цикличната стабилност на оксида, вследствие на ефективна защитата на оксидното ядрото по отношение на структурна деградация и странични реакции с електролита.
- Експериментално е доказана концепцията за постигане на коласални интеркалационни капацитети чрез повърхностната модификацията с цериев диоксид. Обект на изследване бяха два класа слоести оксиди, проявяващи редокс реакции с участие на решетъчния кислород: натриево-манганови оксиди и литиеви рутенати. В хода на интеркалация на натрий и литий е показано, че  $\text{CeO}_2$  има положителен ефект както върху капацитета, така и върху цикличната му стабилност. Положителният ефект на модификатора  $\text{CeO}_2$  е свързан с неговата способност да стабилизира кислородната активност при оксидите.
- При използване на литиеви рутенати като моделна оксидна система с кислородна активност бе установено ново свойство. То се състои в електрохимична пулверизация на литиевия рутенат и последваща миграция през сепаратора на наночастици с размери около 2 nm. Особеното тук е, че процесът на разряд остава непроменен.
- Идентифицирана бе чрез ex-situ XRD анализи нова структурна модификация при почти напълно делитирания  $\text{Li}_2\text{RuO}_3$ . Показано е, че в хода на деинтеркалация на литий от литиев рутенат се извършва структурен преход от O3 към O1-тип структура.
- Разработена е процедура, която може успешно да се приложи при оползотворяване на големи обеми от натрупана некондиционна руда край село Одърци, Добрич.

Процедурата се състои от няколко стъпки: извличане и получаване на манганов (II) карбонат, който е използван за получаване на електродни материали за натриево-йонни батерии. В хода на тази процедура се получават също гипс и пясък, които могат да намерят приложение като инертни материали в строителството. Предложената процедура постига една цялостна преработка и оползотворяване на отпаден продукт.

- В търсене на евтини и ефективни електродни материали за натриево-йонни батерии, са предложени твърди въглероди получени от био-отпадъчни продукти като утайка от кафе и черупки от орехи. По метода на Бьом са определени кислород-съдържащи функционални групи с нарастваща киселинност и на общото количество на групите с основен характер. От изследваните биовъглероди с най-голям специфичен капацитет се отличават биовъглероди, получени от кафени утайки при 1300°C и от орехови черупки при 1300°C, но предварително киселинно третирани. Също така, тези биовъгленни показват изключителна обратимост на реакцията на взаимодействие с натрий, което води до добра стабилност на капацитета при многократно циклиране на електрохимичната клетка.
- Предложена е иновативна методика на основата на електрохимия, електронен парамагнитен резонанс и трансмисионна електронна микроскопия за описание на механизма на взаимодействие на биовъглеродите с натрий. Въз основа на тази методика е показано, че при потенциали над 0.1 В биовъглените взаимодействат с натрий благодарение на реакции на интеркалация на натрий в графено-подобните слоеве (порядък от около 3 до 6 слоя), а под 0.1 В се образуват натриеви кълъстери, чийто размери зависят от текстурата на въглеродната матрица. Постигането на висок обратим капацитет при биовъглените се дължи на образуването на натриеви кълъстери с размери около и под 2 нм, докато реакцията на интеркалация на натрий между графено-подобните слоеве осигурява добрата циклична стабилност.
- Съхранението на Na от биовъглероди зависи още и от съдържанието и разпределението на минералната пепел в тях. Тази пепел не оказва влияние върху механизма на съхранение на Na, но спомага за подобряване на цикличната стабилност и кулонова ефективност. Това се дължи на взаимодействието електрод-электролит, при което се образуват повърхностни електрохимични слоеве. Положителният ефект на минералната пепел върху съхранението на натрий разкрива, че не е необходимо да се използват допълнителни и скъпи процедури за отстраняване на минералната пепел.
- Предложен е нов клас от биполярни органични електроди за литиево-йонни и хибридни батерии. Това са пери-диселеноло-заместени 1,8-нафталамиди, чиято молекулната архитектура е безпрецедентна в химията на нафталамидите. Показано е, че под 2,0 V нафталамидите взаимодействат с максимум 6 Li<sup>+</sup> поради последователната редукция на диселенидния мост и карбонилните групи, докато над 4,0 V окислението на нафталамидите се извършва с участието на електролитния трифлуорометансулфонилимиден анион.
- Разработена конструкция на пълни натриево-йонна клетка с анод на основата на натриево-титанови наножици. Като катоди могат да се използват натриево-железен-фосфат-пирофосфат или слоест натриево никелово-манганов оксид. В зависимост от катода, клетките работят в два волтови прозореца: между 1.5 – 3.5 V и между 1.0 – 4.15 V, при което освобождават работни капацитети около 60 mAh/g и около 80 при скорост на заряд 2 часа. Получените резултати са добра насока за създаване на натриево-йонни

батерии.

- Създадена е реляционна база данни MASTER-DB, която няма аналог в световната литература. За тази цел е разработена програма с графичен интерфейс, позволяваща добавяне на данни за нови електродни материали и визуализация на вече съществуващите данни. Дефинирани са критерии за събиране на данните и идентифициране на дескриптори за връзката “електродна повърхност - електрохимични свойства”. Тази база данни ще бъде надградена и през следващите години.
- Предложен е оригинален подход на базата на рекурентна невронна мрежа от тип „Echo State Network“ за предсказване на еволюцията на потенциала във времето на даден електрод. Подходът е тестван при органичен катод в моделна литиево-йонна клетка. Резултатите показват сравнително добро съвпадение между предсказаните и измерените стойности на потенциала. Освен това алгоритъмът е в състояние да определи момента от време, в който специфичният капацитет на клетката започва да намалява осезателно.

### *Хибридни материали за суперкондензаторни системи*

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

- Съвместно с колеги от ИЕЕС-БАН се провеждат изследвания за влиянието на метода на получаване и морфологията на композити на основата на илменитен тип никелово-манганов оксид и редуциран графенов оксид върху електрохимичните свойства като хибридни суперкондензатори в алкални водни електролити. Получените данни показват, че при циклиране за 10 000 цикъла капацитивните характеристики на композита, получен чрез опростена процедура на сухо смилане превъзхождат композита, получен чрез ултразвукова обработка, както и чистия редуциран графенов оксид.

### *Нанокompозитни материали за акумулиране на водород*

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

- През годината продължиха изследванията върху хидриди на основата на  $MgH_2$  с добавки от V или Ni и активен въглен, получен от различни селскостопански отпадъчни продукти. Установено е, че най-висок капацитет от 5.3 мас% при 300 °C и налягане 1 MPa показва композита съдържащ 80 мас.  $MgH_2$  % - 15 мас. % Ni - 5 мас. % активен въглен получен от полиолефинов восък, а най-нисък от 3.8 мас. % за 80 мас.  $MgH_2$  % - 15 мас. % V - 5 мас. % активен въглен получен от костилки от праскова.
- Съвместно с колеги от Университета в Мугла, Турция, са изследвани сплави със състав  $Mg_{0.5}Al_{0.25}Ni_{0.25}Fe_{0.25}Cr_{0.25}$  и  $Mg_{0.5}Al_{0.25}Ni_{0.25}V_{0.25}Cr_{0.25}$  за съхранение на водород. За постигане на по-високи капацитети е необходимо сплавите да се активират предварително. По-добри свойства показва сплавта съдържаща желязо,  $Mg_{0.5}Al_{0.25}Ni_{0.25}Fe_{0.25}Cr_{0.25}$ : сравнително бърза абсорбция при 300°C и абсорбиционния капацитет от 2.04 мас. %  $H_2$ , докато десорбцията дори и при 350°C след 1 час достига 1.6 мас. %. Въз основа на електрохимичните изследвания бе показано, че тази сплав достига максимален електрохимичен капацитет от 269 mAh/g и задържа почти 52 % от този капацитет след 50 цикъла на разреждане и зареждане. Получените резултати показват, че този тип сплав има

перспективни, както електрохимични така и обемни свойства по отношение на съхранение на водород.

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

Тази тема се разработва основно от Лаборатория „Високотемпературни оксидни материали“, в охарактеризирането участват учени от Лаборатории „Кристалохимия на композитни материали“ и „Електронна спектроскопия на твърди повърхности”

- Синтезирани са, структурно са охарактеризирани и изучени луминесцентните свойства на оксидни стъкла и стъклокерамики в системите -  $ZnO-B_2O_3$ ;  $ZnO-B_2O_3-Nb_2O_5-Eu_2O_3$ ;  $MoO_3:WO_3:La_2O_3:B_2O_3:3Eu_2O_3$  с потенциално приложение като диодни материали и матрици за лазерно приложение. Изследван е ефектът от добавянето на  $WO_3$  и  $Eu_2O_3$  върху свойствата на получените нови материали.
- Чрез лазерна аблация на  $Eu^{3+}$  дотирано стъкло със състав  $50ZnO:40B_2O_3:5WO_3:5Nb_2O_5$  (mol %) са получени наночастици, със същите луминесцентни свойства както на изходното обемно стъкло. Демонстрираната запазена луминесценция може да намери приложение при изследване и диагностика в областта на биофотониката, както и за получаване на луминесцентни материали.
- Определени са оптималните условия за синтез на стъкло-керамика с основна кристализираща фаза  $Li_2CaGeO_4$  дотирана с хром 0.1, 0.2 и 0.5 at% спрямо съдържанието на германий в стъклото. Изследвани са нейните термични, оптични и спектрални характеристики с цел по-нататъшно оптимизиране на характеристиките на стъкло-керамиката за получаване на ефективна лазерно активна среда с излъчване в диапазона 1.1-1.6 nm. Посредством ЕПР спектроскопия е определено разпределението на хромните йони в синтезираните стъклокерамики.
- С цел получаване на бяла светлина са изследвани оптичните характеристики на зео-тип микропориозен силикат  $K_3YSi_3O_9$  дотиран с диспросий. Установено е, че при съотношение на  $Dy/Y=0.1$  цветните координати на образците са най-близко разположени до бялата точка (0.33; 0.33). При възбуждане с дължина на вълната 350 nm излъчваната светлина е топло бяла, а при възбуждане с дължина на вълната 377 nm излъчваната светлина е студено бяла.
- По механохимичен път са синтезирани  $CaWO_4$  и  $SrMoO_4$  с две скорости на активиране от 500 и 850 оборота. Установени са факторите влияещи върху интензитета на луминесценцията на образците от получени по твърдофазен метод и директен механохимичен синтез: форма на частиците, размер на кристалитите и симетрия на структурните единици.
- Посредством фотоелектронна спектроскопия са характеризирани монокристали от  $PdSe_2$ , хетероструктури от  $WSe_2/PtSe_2$ , както и монокристали от  $WTe_2$  израснали от собствена стопилка. Този клас съединения имат редица потенциални приложения в електронни и оптоелектронни устройства като полеви транзистори и ширококолентови чувствителни към поляризация фотодетектори и сензори.

### ***Нанокмпозитни материали с биомедицинско приложение***

**Темата се разработва от учени от Лабораториите „Солеви системи и природни ресурси“, „Високотемпературни оксидни материали“, „Кристалохимия на композитни материали“, „Материали и процеси за опазване на околната среда“ и "Реактивност на твърди повърхности".**

- Чрез зол-гел метод са синтезирани двукомпонентни  $\text{TiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5$  прахове със силни антибактериални свойства спрямо *E. coli K12*. Получени са и хибридни материали съдържащи Тетраметил ортосиликат (TMOS) и Поливинил пирилодон (PVP), за които е доказано, че проявяват силни антимикробни свойства. Тяхната ефективност се засилва в комбинация с антибиотици, при което се инхибира растежа на различни грам-положителни и грам-отрицателни шамове микроорганизми.
- Съвместно с колеги от Факултета по Фармация (ФФ) на МУ-София продължиха изследванията върху намаляване на токсичността на противотуморния препарат доксорубицин. Установена е високата му ефективност на капсулиране и забавено освобождаване при лечението на рак на кожата. Ефективността е аналогична и при включването на доксорубицин в наногел от природните полимери хитозан и албумин, както и в хидрогел на базата на Poloxamer 407 и модифицирани с олеинова киселина аминопропил функционализирани мезопорести силициевооксидни наночастици. Капсулирането на доксорубицин заедно с кверцетин в хитозан-алгинатни наночастици осигурява термична стабилност и продължително и синхронизирано освобождаване на двете лекарства с изразено освобождаване в киселинни условия. Намерено е тясно разпределение на размера на частиците на хидрофилен доксорубицин и хидрофобен ресвератрол в комплексен наногел от хитозан, говежди серумен албумин и хидроксипропил- $\beta$ -циклодекстрин. Двойно натовареният наногел способства за намаляване кардиотоксичността и невротоксичността.
- Съвместно с колеги от ФФ на МУ-София глюкостероидът Будезонид с противовъзпалително действие беше успешно капсулиран в анионен кополимер Eudragit и хомогенно вграден в два вида хидрогелове, базирани на метилцелулоза или Pluronic F127. Наночастиците притежават отрицателен повърхностен заряд, който е предпоставка за колоидна стабилност и подобро проникване.
- Съвместно с колеги от ФФ на МУ-София са изследвани и наногелове на базата на полизахарида агар, модифициран с акрилова или метакрилова киселина, натоварени с противотуморния препарат 5-флуороурацил. Установено е, че освобождаването на лекарството зависи от рН на средата, като при ниско рН гелът с акрилова киселина е по-ефективен, а при високо рН - този с метакриловата киселина.
- Продължиха изследванията върху калциеви фосфати с биомедицинско приложение. Установено е, че химичният състав и структура на утаяваните калциеви фосфати в среда на изкуствена слюнка и в среда на симулирана тъканна течност в интервала на рН 6.5–8.5 са аналогични при двата електролита, но зависят от начина на смесване на изходните разтвори, както и от наличието на ниско молекулни аминокиселини глицин и валин. Посочените резултати са прогнозираны чрез термодинамично моделиране и са експериментално потвърдени.

- Хибридни материали между полисулфо/карбокси бетаин и аморфен калциев фосфат в различни съотношения (4-8% полимер) са получени чрез адсорбция на полимерните хидрогелове от аморфен калциев фосфат. Доказано е по-силно вътрешномолекулно взаимодействие на поликарбоксибетаина отколкото на полисулфобетаина с  $\text{Ca}^{2+}$  йони.
- При *in situ* утаяване на калциев фосфат в присъствие на полианионната полиакрилова киселина (РАА) и съотношение  $\text{Ca}^{2+} : \text{РАА} > 1$  се получава дикалциев фосфат дихидрат (DCPD). При съотношения  $\text{Ca}^{2+} : \text{РАА} \leq 1$  утаяване не протича поради силното комплексообразуване Са-РАА в разтвора.
- Установено е, че аморфен калциев фосфат (АСР) и енергийно активирана бифазна смес  $\beta$ -трикалциев фосфат (ТСР)+хидроксиапатит (НА) са подходящи компоненти за системи за реминерализация на зъбен емайл, за разлика от дикалциевия фосфат дихидрат (DCPD).
- Изучени са процесите протичащи на междофазовата повърхност твърдо / течнo тяло при престой в де- и реминерализиращи разтвори на таблетки от синтетичен и природен хидроксиапатит с химичен състав на повърхността близък до този на зъбния емайл. Доказано е, че те могат да служат като приближен модел на зъбния емайл и са установени механизмите на разтваряне. Природният хидроксиапатит проявява аналогично поведение като синтетичния, но се характеризира с по-голяма инертност в деминерализационна среда.
- Показано е, че способността на калциево-силикатните зъбни цименти да освобождават калциеви йони във водна среда с образуване на калциев карбонат зависи от съдържанието на алуминий в тях.
- Изучено е влиянието на два различни амина при пасивация на златни наночастици с потенциално приложение, като антибактериални агенти. Установено е, че диоктадециламина образува по-подредени и с по-малко дефекти 2D структури в сравнение с октадециламина.

#### ***Перовскитни материали за преобразуване на енергия***

**Тази тема се разработва от учени от Лаборатория „Кристалохимия на композитни материали“.**

- Комбинирано изследване посредством рентгенова дифракция, инфрачервена спектроскопия и диференциално сканираща калориметрия е довело до детайлно установяване на броя и температурите на фазови преходи на метиламоний бисмутов йодид и формаидин бисмутов йодид ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BiI}_3$  и  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BiI}_3$ ). И двата комплексни органично-неорганични перовскита се считат перспективни материали за приложение в ново поколение фотоволтаични клетки.

#### **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“, „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“.**

- Чрез XPS са изследвани катализатори на основата на ZnO дотирани с Ti/Eu, получени в САН-Белград чрез спрей пиролиза. Резултатите доказват присъствието на европий в 2+ и 3+ степен на окисление, което потвърждава, че Eu е инкорпориран успешно в кристалната решетка на ZnO.

- Проведени са съвместни изследвания с колеги от Института по Катализ за получаване и охарактеризиране на нанокристални ферити със състав  $(\text{Cu}_{0.5}\text{Ni}_{0.5})_y\text{Fe}_{3-y}\text{O}_4$ ,  $y=0.25, 0.5,$  и  $0.75$ . Определени са химичния състав, окислителното състояние на елементите на повърхността и е доказано формирането на шпинелна структура за всички проби. Системите са тествани за каталитична активност в реакцията на разлагане на метанол. Изследвани са и  $\text{CeO}_2$ -дотирани  $\text{MgNi}/\text{SiO}_2$  катализатори за хидрогениране на растително масло. Резултатите от XPS анализа показаха присъствие на метален Ni в тях.
- Като част от съвместни изследвания с колеги от Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия – БАН чрез XPS са изследвани биметални (Ni-Co, Ni-Cu) катализатори, нанесени върху зеолит от пепел. Определена е концентрацията и химичното състояние на металите в активната фаза.
- Установено е, че катализатор на основата на Pd-Co, нанесен върху анодизиран алуминий, притежава много висока активност при реакции на каталитично окисление на C1 - C6 въглеводороди. Допуснато е, че пълното окисление на метана протича чрез дисоциативна адсорбция върху PdO и образуване на хидроксилни и метилови групи. Според резултатите от експерименталните данни, инструменталните методи, кинетичните измервания и DFT - изчисления е предположено, че реакцията на пълно окисление на метан най-вероятно протича чрез механизма на Марс-ван Кревелен. Получените данни за кинетиката са използвани за симулация на окисление на метан в пълно мащабен адиабатен реактор.
- Разработен е подход за синтез чрез зол-гелен метод на Pd/La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CeO<sub>2</sub>-ZrO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> катализатор. Получени са данни за неговата каталитична активност, термична стабилност и поведение в присъствие на водни пари. Демонстриран е подход за оценка на възможностите за практическото му приложение чрез нанасяне върху керамични екструдати като стъпка към създаване на монолитни катализатори за намаляване на емисиите от метан.
- Чрез екологичен метод е синтезиран Pd-съдържащ La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/ZnO катализатор. Резултатите от изследванията показват, че паладият е равномерно разпределен по повърхността на носителя под формата на Pd<sup>0</sup>, Pd<sup>2+</sup> и Pd<sup>4+</sup>. Получени са данни за каталитичната активност в реакцията на пълно окисление на метан, пропан и бутан.
- Изследвани са катализатори на основа на мезопорьозните материали MCM-22 и MCM-41, както и на основата на зеолита Beta-11, нанесени с благородни метали – злато, сребро и паладий. Каталитичната активност и термичната стабилност на образците беше тествана в условия, близки до тези в промишлеността в реакциите на пълно окисление на метан, етан, пропан, толуен и CO, като резултатите показаха най-голямо съвпадение при механизма на Марс – ван Кревелен. Синтезираните благородни наноструктурирани материали имат потенциал за практически приложения поради тяхната висока активност и стабилност.
- Установено е, че съставът на Ni<sub>x</sub>Sn<sub>y</sub>/Ce(Zr)O<sub>2</sub> катализатори и реакционните условия, са предпоставка за насочване на процеса на реформинг с водна пара в посока различни както течни, така и газообразни продукти. Те могат да бъдат използвани за настройване на разпределението на продукта както на течна, така и на газообразна фаза. Увеличаването на съдържанието на калай изтегля реакцията към метаниране при неутрални условия, въпреки

че намалява конверсията, а в алкална среда, се увеличава степента на конверсия добивът на водород.

- Биметални катализатори, съдържащи 5 тегл.% Ni и 2,5 тегл.% Cu, са нанесени върху зеолити с различни структури. Катализаторите са изследвани за подобряването на леулиновата киселина (LA), получена от лигноцелулозна биомаса. Установено е, че текстурните параметри на катализаторите имат по-малко влияние върху каталитичната активност, а по-скоро върху стабилната дисперсия на металите по време на реакцията. Установена е промяна в структурата на носителя при каталитичната реакция. Високата конверсия на LA и добивът на гама-валеролактон се отдават на слабо киселинния характер на носителя и умерената хидрогенираща активност на високодисперсните Ni-Cu активни центрове.
- Синтезирани са серия нанокристални медно-никелови ферити с шпинелна структура и е изследвана тяхната каталитична активност при окисление на етилацетат и разлагане на метанол. Установено е че степента на конверсията и селективността по CO<sub>2</sub> се увеличават с температурата и този ефект е най-изразен за (Cu<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>)<sub>0.5</sub>Fe<sub>2.5</sub>O<sub>4</sub>. След реакцията структурата на кубичния шпинел се запазва, като се наблюдава прекристализация на феритни частици. При разлагането на метанол, най-активен е катализаторът със състав (Cu<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>)<sub>0.25</sub>Fe<sub>2.75</sub>O<sub>4</sub>. При тази реакция фазата на изходния шпинел се разлага с образуването на Hägg карбид.
- Нов йерархично структуриран β-Ni(OH)<sub>2</sub> под формата на пясъчни рози е произведен чрез бърз и прост процес на разтваряне. Формираният in-situ наноразмерен NiO катализира процеса на разлагане на амониев перхлорат (AP), който е основният компонент на твърдите ракетни горива. Показано е, че този материал понижава температурата на разлагане на AP с 68,5°C.
- Изследвани са катализатори от сътаени Ni, Mg и CeO<sub>2</sub> върху носител от силикагел. Използването на Mg и CeO<sub>2</sub> в Ni/SiO<sub>2</sub> катализатора подобрява достъпността на металния Ni, подобрявайки активността на хидрогениране и цис/транс селективността по време на хидрогенирането на растителни масла. Включването на церия не само повишава активността на хидрогениране, но също така помага за контролиране на съотношението на цис и транс мастни киселини в продуктите, получени от частично хидрогениране на слънчогледово масло.
- Изследвани са ефектите на зависимостта на микровълновата абсорбция от състава на композити съдържащи магнетитни наночастици в сътрудничество с колеги от Института по електроника - БАН. Чрез вариране на състава е постигнато екраниране на електромагнитно излъчване в редица честотни диапазони. Такива нанокомпозитни структури могат да намерят приложения като детектори на микровълнови електромагнитни вълни или като антирефлексни покрития.
- Съвместно с колеги от Института по електроника - БАН и Полската академия на науките е изследван ефектът на смесено заселване на Me<sup>2+</sup> позицията в кристалната структура на Y-тип хексаферит с немагнитни (Mg<sup>2+</sup>) и магнитни (Ni<sup>2+</sup>) катиони върху наблюдаваните магнитни характеристики на бариєво-стронциев хексаферит. Резултатите показват, че подходящо комбиниране на магнитни с немагнитни двувалентни катиони може да бъде ефективен начин за контролиране на магнитните обменни взаимодействия и настройка на температурата на магнитния преход от спирално към феримагнитно подреждане при температури по-високи от стайната.

Резултатите биха били полезни при разработване на приложения на тези материали в областта на телекомуникациите и управлението на химически процеси.

### **Оксидни тънки слоеве и нанопрахове за фотокаталитични приложения**

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

- $\text{TiO}_2$  прахове са получени по зол-гел метод и са модифицирани с  $\text{ZnO}$ ,  $\text{La}_2\text{O}_3$  или  $\text{Ag}$ . Установено е, че в присъствие на УВ светлина разграждат фармацевтични продукти (парацетамол) и хранителни добавки (Тартразин), което ги прави добри фотокатализатори за пречистване на отпадни води.
- Получени са фотокаталитично активни  $\text{ZnO}$  тънки зол - гел слоеве чрез прилагане на нова двустепенна процедура на сушене, включваща обработка с горещ въздух ( $90\text{--}95^\circ\text{C}$ ) и конвенционално сушене ( $140^\circ\text{C}$ ). Степента на разграждане на багрилото Малахитово зелено е  $82\%$  и  $90\%$  под действие на ултравиолетова и видима светлина. Филмите запазват стабилността си до 6 фотокаталитични цикли, което се дължи на обработката с горещ въздух, която предизвиква намаляване на свободните места за кислород (кислородни ваканции), както и образуването на кислород и/или цинк в междувъзлията на решетката ( $\text{O}_i$  и/или  $\text{Zn}_i$ ).
- При съвместни изследвания с колеги от Института по полимери и Института по минералогия и кристалорафия “Акад. Иван Костов” са получени нови влакнести целулозни субстрати, импрегнирани с мета-полибензимидазол (PBI)-стабилизирани въглеродни нанотръбички/цинков оксид с различно тегловно съдържание на  $\text{ZnO}$ , който е медиран от растителни екстракти. Изследван е потенциалът на синтезираните хибридни композити за разграждане на багрилото Метиленово синьо (МВ) като модел на замърсител във водни разтвори при UV облъчване. Композитите са изследвани с XPS и е установено, че на повърхността им се регистрират C, O, Na и Zn. Определен е количественият състав на повърхността. От разложените спектри на въглерода са определени различните му връзки и са изчислени концентрациите на различните видове въглерод.
- Посредством XPS е изследван моноклинен  $\text{BiVO}_4$  синтезиран чрез модифицирана зол-гел техника. Под въздействието на слънчева светлина  $\text{BiVO}_4$  показва висока фотокаталитична ефективност до  $96\%$  разграждане на метиленово синьо (МВ), постигнато в рамките на 120 минути. Предложен е фотокаталитичен механизъм в съответствие с теста за почистване.
- Нови фотокаталитични активни композити  $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Ce}_4\text{O}_7\text{-ZnO}$ , дотирани със сребро и синтезирани чрез техника на съутаяване и използване на кополимера Pluronic P123. Чрез XPS са установени свързващите енергии на елементите на повърхността, както и окислителното им състояние. Изчислени са стойностите на модифицирания Auger параметър за цинк и сребро -  $2010.5\text{ eV}$  и  $724.4\text{ eV}$ , които съответстват на  $\text{Zn}^{2+}$  и  $\text{Ag}^{2+}$  степени на окисление. Сребърният допант повишава фотокаталитичната ефективност за разграждане на багрилото Reactive Black 5 ( $78\%$ ) при 150 минути UV облъчване в сравнение с тази на недотираната проба ( $52\%$ ). А недотираната проба демонстрира по-висока фотокаталитична способност за разграждане на багрилото Malachite Green (при 150 минути -  $80\%$ ).
- Чрез методите на зелената химия са получени нови нанокompозитни мембрани от АВ-полибензимидазол (АВ-РБИ) с инкорпорирани частици от  $\text{TiO}_2$ .  $\text{TiO}_2$  частиците са

синтезирани с участието на различно съдържание растителен екстракт чрез хидротермално активиране, последвано от термична обработка. Постигната е висока фотокаталитична активност на мембраните АВ-РВІ/био-ТіО<sub>2</sub> (степен на обезцветяване на багрилото Reactive Black 5 96%) след 180 минути UV облъчване с UV-светлина. Материалите показаха също и силен антибактериален ефект върху *E. coli*, при облъчване с UV светлина

### ***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“.**

- Проведени са експерименти за определяне на адсорбционните свойства на дървени стърготини (FW), отпадък от мебелната промишленост, по отношение на Cu(II) йони с цел използването им за пречистване на води. Изследванията на адсорбционната способност на дървените стърготини се провеждат спрямо едноелементен воден разтвор на мед, като концентрациите на металните йони в изходните разтвори и в тези след адсорбцията са определени с метода рентгенофлуоресцентна спектроскопия с пълно вътрешно отражение (TXRF). Изследвано е влиянието на рН на изходния разтвор, на времето на контакт и на началната концентрация върху количеството адсорбирани йони. Изчислени са кинетичните параметри и константите на изотермите по Лангмюир, Фройндлих и Дубинин-Радускевич, както и максималния адсорбционен капацитет
- Определена е ефективността на къспе от масло от семена на черен кимион като биосорбент за премахване на багрилото Толуидиново синьо от водни разтвори. Определени са оптималните параметри, влияещи върху процеса на адсорбция, а механизмът на адсорбция е анализиран чрез различни изотерми, кинетични модели и термодинамични параметри. Високият максимален адсорбционен капацитет на биоматериала и възможността за лесна регенерация подчертават неговата отлична ефективност за пречистване на води от катионни багрила.
- Изследвана е ефикасността на алжирски тамазертов каолин като адсорбент за отстраняване на Cr(III) от отпадъчни води. Чрез XPS е показано че, силиций, кислород (с най-висока концентрация), алуминий, желязо и калий са съставните елементи на каолиновата повърхност. Съдържанието на въглерод показва количеството органична материя в изследвания повърхностен слой.
- Демонстрирана е ефективността на евтини целулозни биосорбенти, получени от люспи на лимец, за отстраняване на сребърни йони от водни разтвори. Изчислените стойности на свободната енергия на Гибс потвърждават, че физисорбцията е преобладаващият механизъм на адсорбция. Целулозните биоматериали демонстрират висок адсорбционен капацитет. Резултатите от XPS анализа потвърждават образуването на метални Ag-кълъстери върху повърхностите на биоматериалите.
- Съвместно с ФХФ - СУ е приложен подходът на пълния факторен дизайн за изясняване на оптималните експериментални условия за биосорбция на медни йони върху отпадъчен материал от маточина (*Melissa officinalis L.*). Процедурата на експериментален дизайн предлага надеждни регресионни модели с високи коефициенти на корелация за изчисляване процента на адсорбция и максималното адсорбирано количество медни йони. Доказаната приложимост на простите линейни регресионни модели, предоставя лесен и ефективен метод за определяне на оптималните условия за осъществяване на биосорбционния процес.

- Извършено е аналитично охарактеризиране на материали на основата на етерично-маслените растения лавандула (*Lavandula angustifolia L.*) и маточина (*Melissa officinalis L.*), както и на отпадните продукти след извличане на етеричните масла от тях. ИЧ-анализът установи функционалните групи, участващи в адсорбцията на медни(II) йони върху повърхността им. Установено бе, че карбоксилни, фенолни, алкохолни, както и етерни и естерни групи вземат участие в адсорбцията на медните йони.

***Адсорбенти за CO<sub>2</sub> и за съхранение и пречистване на съвременни горива***

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

- Разработени са нов тип микропорести медни силикати с отрицателно заредена решетка и без наличие на алкални хидроксиди в порите. Това е постигнато чрез контролирано отстраняване на алкални катиони по време на синтеза. Практическото значение на този резултат се изразява в потенциала за използване на материалите за адсорбция на CO<sub>2</sub>.
- Посредством ИЧ спектроскопия и DFT изчисления е изучена адсорбцията на CO<sub>2</sub> върху CaX зеолит. Установено е, че при стайна температура CO<sub>2</sub> първоначално образува линейни Ca<sup>2+</sup>-OSO комплекси, които с увеличаване на равновесното налягане първо се превръщат в Ca<sup>2+</sup>(CO<sub>2</sub>)<sub>2</sub> и след това в Ca<sup>2+</sup>(CO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>. Това е причината за много високия адсорбционен капацитет за CO<sub>2</sub> на материала - неговата стойност, 22.2 тегл.% при 273 K и 490 mbar, е сред най-високите, докладвани в литературата при подобни условия. Изследвано е и влиянието на H<sub>2</sub>O върху процесите. В присъствието на водни пари се образуват смесено-лигандни комплекси - Ca<sup>2+</sup>(CO<sub>2</sub>)<sub>x</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>y</sub> (x + y = 2 или 3). Адсорбционният капацитет на материала се увеличава с повишаване на температурата на активиране до 673 K поради дехидратация.

***Инфрачервена спектроскопия на повърхностни съединения и механизми на каталитични реакции***

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

- Проведено е подробно изследване с инфрачервена спектроскопия (ИЧ), теория на функционала на плътността (DFT) и трансмисионна електронна микроскопия (ТЕМ) с висока резолюция на стехиометричен CeO<sub>2</sub> с различен хабитус на нанокристалите (кубчета, пръчки и полиедри). Тези анализи разкриват механизма на адсорбция на вода върху различни нискоиндексни стени, както и локализацията и координационното състояние на свободните Ce<sup>4+</sup> центрове, образувани при дехидратация и дехидроксилиране. Идентифицирани са карбонилните комплекси на различни стени на кристалите и е анализирана тяхната структура. Тези резултати допринасят за разработването на СО като ИЧ молекула-сонда за характеризиране на CeO<sub>2</sub> повърхности.
- Чрез *in situ* ИЧ спектроскопия са установени нови данни за механизма на реокисление на цериев диоксид, редуциран с H<sub>2</sub>. Открито е формирането на повърхностни пероксиди, които директно се разлагат до решетъчен кислород, както и супероксиди, които в присъствие на остатъчен водород се преобразуват в хидропероксиди, разлагащи се до терминални хидроксили. Установено е, че основната част от повърхностните Ce<sup>3+</sup> центрове се окисляват дори при криогенни температури.

***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”**

- Композитни ZnO-ZnWO<sub>4</sub> филми, получени от колеги в Египет чрез спрей пиролиза (CSP), са тествани за откриване на въглероден оксид (CO) при различни работни температури. Установено е, че композитния слой ZnO-ZnWO<sub>4</sub> е добър кандидат за откриване на CO при относително ниска работна температура.
- Съвместно с колеги от Института по електроника към БАН са получени и изследвани композитни наноструктури на основата на ZnO. Изследваните структури са синтезирани чрез импулсно лазерно отлагане във въздух при атмосферно налягане. Определена е морфологията и химичния състав, структурата и оптичните свойства на различните системи. Установено е, че пробите ZnO-TiO<sub>2</sub> се състоят от смес от наночастици ZnO и Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> и показват най-добра фоточувствителност към UV светлина.
- Изследван е потенциалът на полупроводников, гофриран графен, отложен върху силициев карбид, като активен елемент в хемосензори. Според огъването на графеновия лист и разстоянията адсорбат - адсорбент, хетероструктурата благоприятства лигандите в реда на диазепам < бензен < TCDD. Максималната промяна на забранената зона в хетероструктурата, причинена от адсорбцията е 0.02 eV. Междумолекулното свързване не променя разликата HOMO-LUMO в бензен и TCDD с повече от 0,01 eV. Адсорбцията на диазепам причинява значителни промени в проектираната плътност на състоянията на двете структури в комплекса. Установено е, че нагънат графен може да се приложи като активен материал в селективни хемосензори за непланарни ароматни молекули.

## **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“**

- Оценена е бионаличността на елементите Al, Fe, Zn, Cu, Cd и Pb в повърхностни води, повлияни от въгледобива и въглепреработвателната промишленост в район Бобов дол в България, чрез изчисляване на химичните им форми с използването на два термодинамични модела – комбиниран модел “Йонна-асоциация - Стокхолм хюмик модел“ (IA-SHM) и „Биотичен лиганден модел“ (BLM). Установено е сходство в резултатите от двата модела във води с доминиращи органометални форми на елементите. При доминиране на неорганични форми (свободни йони, хидрокси и карбонатни форми) се изчисляват разлики в разпределението на формите - най-големи при Zn, следвани от Cd и Pb и незначителни за Cu. Тези разлики се дължат на взаимната конкуренция на металите за комплексообразуване с органичната материя във водите отчетени от IA-SHM, което го прави по-ефективен за оценка на бионаличността на микроелементите.
- Направена е сравнителна оценка на качеството на водите в реките Искър, Струма, Марица и Дунав, в частта им минаваща през градовете София, Перник, Пловдив и Силистра за периода 2021-2023. Резултатите от аналитичните измервания и термодинамичните изчисления показват най-високо замърсяване на водите на река Струма, резултат от дейността на въглищните мини в района.

- През месец ноември е проведено изследване на води и седименти (лиманна кал) от защитена местност „Поморийско езеро“. Установено е, че водите във всички пунктове имат сходни физикохимични характеристики. Средната соленост на езерото е 27 ‰, близка до минималната стойност на средната годишна соленост на езерото (28-44‰).

*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“, „Методична лаборатория по атомна спектроскопия“, „Кристалохимия на композитни материали“

- Продължава разработването на технологии за получаване на нови продукти на основата на черноморска луга и кал. През 2024 г. са разработени и нотифицирани 7 нови козметични продукти по поръчка на бизнеса.
- Оптимизирани са условията на провеждане на конверсия на отпадъчен гипс от процеса десулфуриране на димни газове в топлоелектрическите централи в калциев хидроксид, приложим по-нататък като материал за минерализация на въглеродния диоксид. Полученият  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  е тестван като материал за поглъщане на  $\text{CO}_2$ .
- Съвместно с колеги от Медицински университет – Варна и Университет по хранителни технологии – Пловдив е изяснен метаболомния профил на отглежданата в биореактор *Arthrospira platensis* в България. Резултатите показват, че тя има високо съдържание на маноза и витамин А и високи концентрации на калций, сяра и цинк. Лиофилизираният прах съдържа диетични фибри, протеини и мазнини. Сред ненаситените мастни киселини с най-високо съдържание е  $\alpha$ -линоленовата киселина, докато сред наситените мастни киселини, преобладава палмитинова киселина, а от стеролите преобладава  $\beta$ -ситостеролът. Липсват микроцистини LR, RR, YR и др., което прави *Arthrospira platensis* безопасен за употреба във фармацевтичната и хранително-вкусовата промишленост. Фикоцианин от спирулина е капсулиран в алгинатни перли – биоразградими микросфери, които могат да използват.
- По поръчка на фирма РОНИС, ЕООД, София бе разработена методика за преработване на многотонажен промишлен отпадък, съдържащ алуминиево фолио и пластмаса (PP/PE). Методиката осигурява 100% рециклируемост на двата компонента на отпадъка. Технологията е затворена, безотпадна, не замърсява околната среда, не е енергоемка и като страничен продукт се отделя т. нар. "розов" водород. Преработването на 1 тон отпадък осигурява получаването на минимум  $186 \text{ m}^3$  водород и 150 кг алуминий под формата на алуминиев хидроксид.

### **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 „Електронна спектроскопия на твърди повърхности“ и „Интерметалиди и интеркалационни материали“

- С XPS, посредством промените на енергиите на свързване на фотоелектроните при прилагане на постоянни и/или променливи потенциали, с квадратна вълна (SQW) с различни честоти е изследван моделен суперкондензатор. За целите на изследването бе

конструиран модел на симетричен кондензатор - с графенов оксид-подобни електроди и йонен електролит  $\text{IL}(\text{PF}_6)$ . Анализите бяха проведени чрез Operando XPS, за едновременни XPS и токови измервания. Използван бе широк спектър от честоти за изследване на ефектите от бързата поляризация и бавните миграционни токове, в интервала 10kHz и 0.1Hz. Локалните вариации на електрическия потенциал бяха определени на различни места в моделното устройство. Изследванията са проведени благодарение на финансовата подкрепа на проект *TUBITAK, BIDEB, 2221-Fellowship program for visiting scientists and scientists on sabbatical leave (2023/6)* в периода 01.04.2024-30.06.2024.

- Чрез XPS са изследвани твърди покрития на базата на хром предназначени за промишлено приложение. Измерванията доказаха формирането на фази от  $\text{Cr}_2\text{N}$ ,  $\text{CrN}$ ,  $\text{TiN}$  и  $\text{AlN}$ . Образците са получени чрез магнетронно разпрашване в Централната лаборатория по приложна физика – Пловдив.
- Чрез XPS е установено влиянието на включения от калций върху стабилността на фосфатни покрития, целящи корозионната защита на анодирана алуминиева сплав ( $\text{Al 1050}$ ). След изследвания на корозионната им резистентност, получените слоеве, отново са изследвани чрез XPS, като е установено, че първоначалното анодиране оказва съществена роля върху стабилността на калциево-фосфатните покрития, както и за цялостната корозионна защита на алуминиевата сплав. Установено е, че калцият се намира на повърхността под формата на  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$ . Изследванията са проведени съвместно с колеги от Института по физикохимия-БАН.
- Проведени са XPS изследвания на цериеви конверсионни слоеве, отложени върху анодирана алуминиева сплав ( $\text{AA2024-T3}$ ), които са установили предимствата на предварителното анодиране върху протективната роля на цериевите конверсионни слоеве. Изследвания са в сътрудничество с колеги от ХТМУ – София.
- Чрез XPS са изследвани хетероядрени комплекси от  $\text{Hg(II)}$  и  $\text{Zn(II)}$  с лиганди от натриев моненсинат. Доказано е, че реакцията на натриев моненсинат с  $(\text{MonNa})$  с  $\text{Hg}(\text{SCN})_2$  или  $\text{Zn}(\text{SCN})_2$  в ацетонитрил-метанолен разтвор води до успешното формиране на нови хетероциклени комплекси -  $[\text{Hg}(\text{MonNa})_2(\text{SCN})_2]$  и  $[\text{Zn}(\text{MonNa})_2(\text{NCS})_2]$ . Изследванията са в сътрудничество с колеги от ФХФ – СУ и Институт по органична химия с център по фитохимия-БАН.
- Чрез XPS са изследвани наночастици от  $\text{ZnO}$  с капсулиран в тях инхибитор на корозията кофеин ( $\text{CAF}$ ), които са базирани на на омрежени с триполифосфат ( $\text{TPP}$ ) полизахариди (хитозан ( $\text{CHI}$ ) и натриев алгинат ( $\text{ALG}$ )). Установено, е че на повърхността на наночастиците се наблюдава фазата цинков хидрооксид хлорид  $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ , която е корозионен продукт служещ като ефективна бариера за корозията. Пробите са получени от колеги от Института по Физикохимия-БАН
- Посредством XPS и Оже спектроскопии са изследвани хибридни цинкови покрития с подобрена корозионна устойчивост на базата на хитозанови олигозахариди. Демонстриран е ефектът на покритията върху антикорозионната стабилност на хибридните покрития. Проведените изследвания са в сътрудничество с колеги от Институт по Физикохимия-БАН.
- Проведени са XPS изследвания на високопорьозни наноструктури на база чист цинков оксид и цинков оксид дотиран с благородни метали ( $\text{Ag}$ ,  $\text{Au}$ ), получени чрез лазерна аблация от колеги в Института по електроника-БАН. Резултатите са от значение при разработване и оптимизиране на технология за двустъпална лазерна аблация. Чрез тази

методология са получени и различни наноструктури от железен оксид и композитни материали от железен оксид и злато.

- Посредством фотоелектронна спектроскопия са проведени изследвания върху отделителната работа на електрона в стъкловъглеродни покрития след продължителен престой в Международната космическа станция. Покритията са използвани като двойни сонди за сателитни измервания на електрическо поле и показват по-високи стойности на отделителна работа до 5 eV, което подобрява електрическата проводимост и чувствителността към електромагнитни полета с нисък интензитет. Изследванията са съвместни с колеги от ИКИТ-БАН, ИК-БН и ИОХЦФХ-БАН.
- Съвместно с колеги от ИЕЕС-БАН са изучени чрез ЕПР спектроскопия локалната структура и типа на ваканциите в твърди електролити на основата на заместен с гадолиний цериев диоксид.

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

**Темата се изпълнява от учени в Лаборатория „Теоретична и изчислителна химия“**

- Посредством *ab initio* методи са изследвани дисулфидни кълъстери на Fe, Co, Ni, Cu, Zn, както и техни карбонилни и нитрозилни комплекси в два аспекта: (1) фотохимично индуцирано отделяне на NO от нитрозилните и смесените карбонилно-нитрозилни комплекси, което намира приложение в медицината, (2) фото-каталитична дисоциация на вода и азотни оксиди, при което водородът получен от дисоциация на вода се използва за редуцията на NO. Установено е, че най-висока фото-каталитична активност проявяват комплексите на желязо и кобалт. Нитрозилните и смесените карбонилно-нитрозилни комплекси на Fe<sub>2</sub>S<sub>2</sub> показват по-висока активност за фото-индуцирано отделяне на NO, докато Co<sub>2</sub>S<sub>2</sub> карбонилните комплекси са с по-висока активност в реакциите на разлагане на вода и азотни оксиди. Проведени са и паралелни изследвания със селенидни аналози на комплексите.
- Фотофизичните свойства на две серии от хетеролептични моноалкинилфосфониеви Pt(II) комплекси с 2,2':6',2''-терпиридин (terpy) и 6-фенил-2,2'-бипиридин (phbpy) лиганди са теоретично изследвани с квантово-химични методи (теория на функционал на плътността). Предсказани са енергетичните диаграми на съответните комплекси и механизма на поглъщане, пренос и деактивация на енергията. Чрез подхода на естествените орбитали на прехода (Natural Transition Orbitals) е установена природата на активните синглетни и триплетни състояния и характера на преходите с пренос на заряд-метал-лиганд (MLCT), между-лиганден (ILCT) и вътрешно-лиганден (LLCT).
- С помощта на квантово-химични изчисления е изяснен механизма на вътрешномолекулен протонен пренос в молекулни превключватели, на базата на 7-хидроксихинолин, заместен в 8-ма позиция с C–S единична ос, свързана с три различни протонни крана (морфолин, пиперидин и 1,3,5-диоксазин). Предсказан е ротационният механизъм в основно и във възбудено състояние и са определени неговите стабилни структури за добре познатия протонен кран на Varma, базиран на морфолинова молекула.
- Моделирани са няколко протонни крана, базирани на 7-хидроксихинолин и 3-хидроксипиридин с помощта на изчисления с теория на функционала на плътността (DFT) в основно и възбудено състояние, и в различни среди. Предложен е механизъм на

действие на протонния кран. Резултатите показват, че 3-хидроксипиридинът не е подходящ за протонен пренос, а 8-(имидазо[1,2-а]пиридин-2-ил)хинолин-7-ол и 8-(пиразоло[1,5-а]пиридин-2-ил)хинолин-7-ол демонстрират поведение на неспрегнати протонни кранове, вместо тавтомерно пренареждане в последния.

- Посредством квантово-химични методи и ниво на изчисления DFT/TDDFT/ $\omega$ B97XD са изучени хромофорните свойства на фенацилдифенилфосфинов оксид (Phenac), свързващата му способност за капсулиране и стабилизиране на лантанидни комплекси и потенциала му за усилване на луминесценцията на  $\text{Eu}^{3+}$  и  $\text{Tb}^{3+}$  в серия комплекси в газово състояние, разтвор и твърда фаза. Изчислените енергетични диаграми на Яблонски, скоростите и времето на живот на конкурентните излъчвателни и безизлъчвателни процеси, включващи интеркомбинационна конверсия  $S_1 \rightarrow T_2 \rightarrow T_1$  и скоростите на пренос на енергия от  $T_1$  (Phenac) към  $^5D_1/^5D_0$  ( $\text{Eu}^{3+}$ ) са използвани за предсказване на механизма на антена ефекта. Изяснена е ролята на P=O и C=O групите за координационната способност и абсорбционните свойства на Phenac. Установени са факторите, които са отговорни за усилване на луминесценцията на  $\text{Tb}^{3+}$  и за по-малкия луминесцентен квантов добив на  $\text{Eu}^{3+}$ .
- Теоретично са изследвани фотофизичните свойства на два изоструктурни хетеролигандни лантанидни комплекса с обща формула  $\text{Ln}(\text{pdtc})_3(\text{phen})$  ( $\text{pdtc}$  = пиролидиндитиокарбаматен анион,  $\text{phen}$  = 1,10-фенантролин),  $\text{Ln} = \text{Sm}^{3+}, \text{Eu}^{3+}$ . С помощта на DFT/TDDFT/ $\omega$ B97xD и многоореферентни SA-CASSCF/NEVPT2 изчисления са конструирани енергетичните диаграми на Яблонски, оценени са конкуриращите се процеси във възбудено състояние и е предложен възможен усилващ механизъм на лантанидно-центрирана емисия. Установено е интерлиганден ( $\text{pdtc}$ -към- $\text{phen}$ ) характер с пренос на заряд за първото възбудено състояние ( $S_1$ ). Теоретичното разглеждане показва подобни пътища на релаксация и подходяща енергетична разлика между донора\*( $\text{phen}$ ) и акцептора\*( $\text{Ln}^{3+}$ ) за ефективно заселване на излъчвателните лантанидни нива. Експерименталните измервания в твърдо състояние, обаче, показаха ефективна луминесценция и добра способност за преобразуване на UV във видима светлина само за комплекса  $\text{Sm}(\text{pdtc})_3(\text{phen})$ . Слабата емисия на европиевия комплекс се дължи на частичната редукция на  $\text{Eu}^{3+}$  в основно състояние.

### ***Инструментални методи за анализ на археологични артефакти***

Темата се изпълнява от учени в Лаборатория „Кристалохимия на композитни материали“, „Високотемпературни оксидни материали“ и „Инерметалиди и интеркалационни материали“

- В рамките на проект между община Чавдар и Национален археологически институт с музей при БАН в ИОНХ бяха изследвани керамични образци, намерени в района на с. Чавдар. Извършен е комплексен анализ на състава на глина, ангоба и боя използвана за окраска на керамичните предмети, както и за определяне на температурата им на изпичане, чрез следните методи: рентгенофазов анализ, рентгенофлуоресцентен анализ, термичен анализ, раманова спектроскопия, електронен парамагнитен резонанс.

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

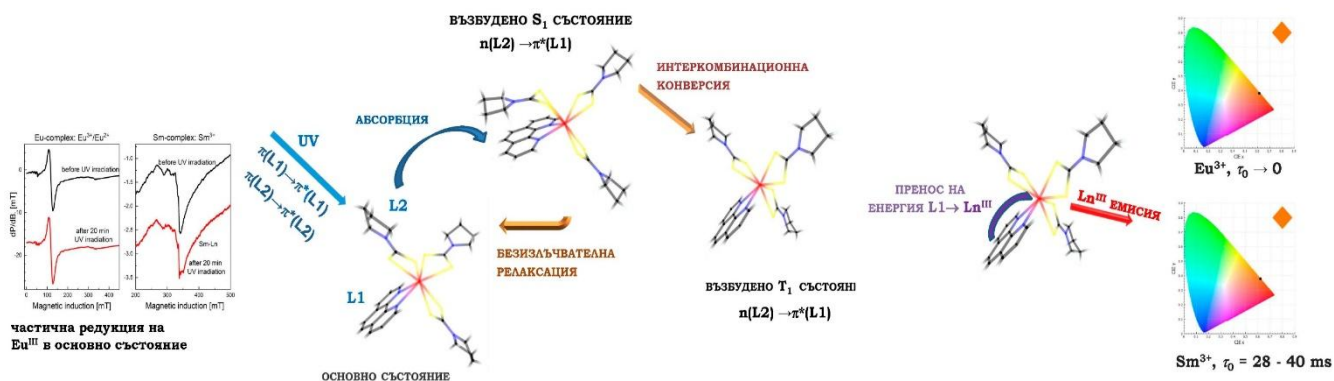
**Темата се изпълнява от учени в Лаборатория „Методична лаборатория по атомна спектроскопия“**

- Оптимизирана е процедурата за анализ с техниката на TXRF с пълно вътрешно отражение на течни включения в минерали е направена серия от измервания на проби с обем 0.5-1  $\mu\text{L}$  от моделен разтвор “Synsol” със състав и концентрации близки до тези на оригиналните включения. Получените резултати дават добро съвпадение на експериментално получените и теоретично изчислените концентрации на анализирани елементи. Най-добра точност и възпроизводимост на резултатите от измерванията е установена при елементите Ca, Mn, Fe, Cu и Ba.
- Изследвани са проби от хвостохранилището на „Асарел-Медет“, отпадни води от флотационни процеси за съдържание на рений чрез класически каталитичен спектрофотометричен метод диметил дитиооксамид и рентгенофлуоресцентна спектроскопия с пълно вътрешно отражение (TXRF анализ). Установено е добро съвпадение на резултатите, получени по двата метода за анализ, като вторият дава възможност за бързо количествено определяне на всички елементи с атомен номер  $> 20$ , включително и рений.
- Чрез рентгенофлуоресцентна спектроскопия с пълно вътрешно отражение са изследвани утайки от кафе съдържащи Cu, Zn и Cd, преди и след протичането на адсорбцията им. Установено е, че времето на експозиция от 100 s е достатъчно за възбуждане на  $K_{\alpha 1,2}$  флуоресцентните линии на Cu и Zn и на  $L_{\alpha 1}$  линията на Cd, което позволява тяхното количествено определяне.

## 2.1. Най-значимо научно постижение в ИОНХ

### Механизъм на луминесценция при хетеролигандни лантанидни комплекси

Подборът на лиганди-хромофори в лантанидни комплекси има значение за разработване на луминесцентни материали за ефективно превръщане на UV във видима светлина посредством антена-ефекта. Чрез комбинирането на иновативни експериментални аналитични методи и теоретични подходи бяха оценени всички конкурентни фотофизични процеси и бе предсказан механизма на абсорбция, пренос и релаксация на енергия при лантанидни ( $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Sm}^{3+}$ ) комплекси с дитиокарбаматни лиганди и фенантролин. Изяснено бе влиянието на лигандите върху лантанидната луминесценция като резултатите представиха ново виждане върху оптичните свойства на комплексите, а именно: 1) междулиганден характер на първото възбудено състояние с пренос на заряд (тъмно състояние); 2) ефективен пренос на енергия във възбудено състояние поради подходящ енергиен резонанс на лигандните донорни и лантанидните акцепторни нива; 3) частична редукция само на европиевите йони в основно състояние, установено чрез уникалното ЕПР изследване на комплексите със и без облъчване и подкрепено от изчисленото разпределение на електронната плътност в основно и възбудено състояние. Разработеният комбиниран експериментален и теоретичен подход за установяване на механизма за пренос на енергия във възбудено състояние и ключовите фактори, контролиращи оптичните свойства и ефективната луминесценция би подпомогнал целевия синтез на нови хетеролигандни лантанидни материали с желани свойства за дадено приложение.



Ръководител на научния екип: проф. д-р Ивелина Георгиева

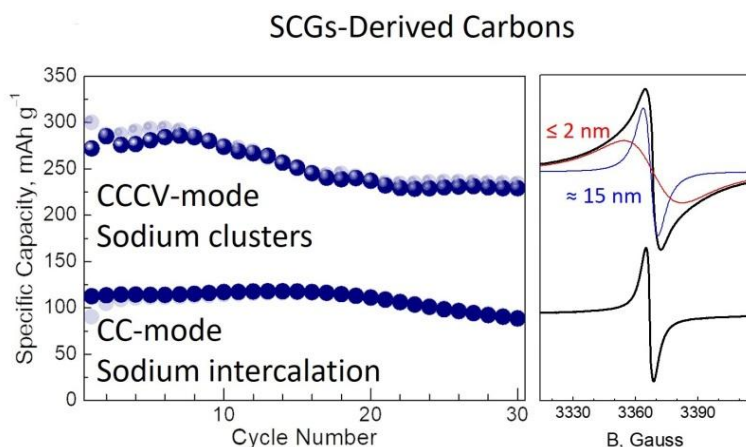
#### Публикация:

**Boris Borrisov**, Martin Tsvetkov, Tsvetan Zahariev, Denitsa Elenkova, Bernd Morgenstern, Deyan Dimov, Rositsa Kukeva, Natasha Trendafilova, and Ivelina Georgieva, *Effect of Pyrrolidinedithiocarbamate Ligand on the Luminescence Properties of Heteroligand Samarium and Europium Complexes: Experimental and Theoretical Study*, Inorg. Chem., **2024**, 63, 13840–13864 (<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.inorgchem.4c00134>), IF 4.3, Q1.

## 2.2. Най-значимо научно-приложно постижение в ИОНХ

### Био-въглеродни материали като аноди за натриево-йонни батерии

Научен екип от Института разработи иновативни анодни материали за натриево-йонни батерии, които за разлика от литиевите, отговарят на строгите изисквания дефинирани в Европейския зелен пакт за безопасност, безвредност, рентабилност и критерии за управление на отпадъците. Разработката се състои в използването на био-суровина на основата на утайки от кафе, която по оригинална синтетична процедура, се превръща в аноден материал, който от своя страна съчетава ниския потенциал на натриране (под 1,0 V спрямо  $\text{Na}^+/\text{Na}$ ) с добрата производителност (специфичен капацитет около 250 mAh/g и отлична стабилност на капацитета при многократно циклиране). Разработената от нас нова физикохимична методика позволява да разграничим конкурентните реакции на адсорбция на натрий, двумерна дифузия и образуване на натриеви клъстери, протичащи при био-въглеродите и отговорни за постигането на висок и обратим капацитет при тях. Съхранението на натрий от био-въглероди зависи още и от съдържанието и разпределението на минералната пепел в тях. Тази пепел не оказва влияние върху механизма на съхранение на натрий, но спомага за подобряване на цикличната стабилност и кулонова ефективност. Положителният ефект на минералната пепел върху съхранението на натрий разкрива, че не е необходимо да се използват допълнителни и скъпи процедури за нейното отстраняване.



Ръководител на научния екип: доц. д-р Мария Калъпсъзова

#### Публикации:

1. R. Kukeva, M. Kalapsazova, S. Harizanova, I. Uzunov, P. Markov, I. Spassova, R. Stoyanova, *Electron Paramagnetic Resonance Monitoring of Sodium Clustering and Its Effect on the Sodium Storage of Biowaste-Derived Carbons*, ACS Appl. Energy Mater. **2024**, 7, 20, 9543–9550, IF 5.5, Q1.
2. S. Harizanova, I. Uzunov, L. Aleksandrov, M. Shipochka, I. Spassova, M. Kalapsazova, *The Beneficial Impact of Mineral Content in Spent-Coffee-Ground-Derived Hard Carbon on Sodium-Ion Storage*. Materials **2024**, 17, 5, 1016, IF 3.1, Q1.

### 3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ИОНХ

Международното сътрудничество на ИОНХ се изразява в изпълнение на: **1)** европейски и международни програми и двустранни проекти към ФНИ, **2)** в рамките на междуакадемични договори и споразумения (ЕБР), **3)** при лично участие на учени в международни проекти, при провеждане на научни изследвания и **4)** публикуване в сътрудничество с чуждестранни учени.

През 2024 г. продължи успешното изпълнение на проект „Master” към програма M-ERA.NET на ЕС за изследвания и иновации в областта на материалите и технологиите за батерии. Проектът е на тема „Контрол на електродната повърхност за постигане на свръхвисок обратим капацитет” и е в сътрудничество с учени от Университета на град Кордоба, Испания; Университета Инону, Малатя, Турция и TÜBİTAK Институт за железопътни транспортни технологии (Тюбитак-Руте), Турция. През годината бе одобрен и един нов проект за финансиране от ФНИ по линия на двустранното научно сътрудничество с Китай на тема „Ефективно улавяне и каталитично преобразуване на CO<sub>2</sub>: Механизъм, обосновка, и интензификация на процеса“.

В ИОНХ се изпълняват два проекта в рамките на междуакадемични договори и споразумения на БАН (ЕБР): с *Египетската Академия за Научни Изследвания и Технологии* (ЕАНИТ) по тема „Текстилни изделия, функционализирани с метал-органични структури (MOF) притежаващи UV-защита, антимикробни и противокмарни свойства“; с *Институт по химия, технология и металургия, Център по Катализ и химично инженерство* Сръбската академия на науките и изкуствата на тема „Екологични антикорозионни хибридни покрития“. Учени от ИОНХ имат лично участие в проекти по ЕБР с CNR-IMM (Катания, Италия) и Египет.

През 2024 г., трима чуждестранни учени (от Англия и Египет) са посетили ИОНХ и в рамките на техния престой са проведени работни срещи, изнесени доклади и обсъдени научни резултати.

В рамките на програмата Widening Participation and Strengthening the European Research Area (WIDERA) на ЕС учен от ИОНХ (Любомир Александров) бе избран от МОН като представител на страната да участва в международна среща в Университета по приложни науки, Турку, Финландия. На срещата той изнесе доклад, с който представи Центъра за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“. Установени бяха контакти с колеги от международни екипи с цел бъдещо сътрудничество по европейски проекти.

Учени от ИОНХ взеха участие в международни школи като „Училище по калориметрия“ (Calorimetry and Thermal analysis School Centre Jean Bosco), организирано в Лион, Франция и Молекулен дизайн на фотоактивни метал-съдържащи системи с перспективни приложения, проведена в Клуж Напока, Румъния.

Учен от ИОНХ е бил на специализация в Турция със стипендия по програма: 2221-Fellowship program for visiting scientists and scientists on sabbatical leave (2023/6), TUBITAK, BIDEV, в периода 01.04.2024-30.06.2024.

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 в Египет, Турция, Австрия, Италия, Русия, Япония, Белгия. В резултат на международното сътрудничество, което ИОНХ поддържа, 35 % от научните публикации са с чуждестранни учени от водещи научни организации.

През 2024 г. ИОНХ участва в **международна редакторска дейност**, резултат от която през месец април излезе от печат книгата (356 стр.) със заглавие Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application (<https://www.mdpi.com/books/reprint/9082-size-dependent-effects-in-materials-for-environmental-protection-and-energy-application>), в списание Materials (**реферираното научно списание с отворен достъп, Q1, IF=3.7**), с

издателство MDPI. Книгата съдържа **22 публикации** на съавтори от ИОНХ по съответната тематика. Всички статии са рецензирани от независими международни рецензенти, следвайки практиката на издателство. В момента се подготвя второ специално издание със заглавие *Size-Dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application – 2<sup>nd</sup> Edition* към списанието.

## **ЗНАЧИМ МЕЖДУНАРОДЕН ПРОЕКТ**

### **ПРОГРАМА M-ERA.NET**

#### **КОНТРОЛ НА ЕЛЕКТРОДНАТА ПОВЪРХНОСТ ЗА ПОСТИГАНЕ НА СВРЪХВИСОК ОБРАТИМ КАПАЦИТЕТ**

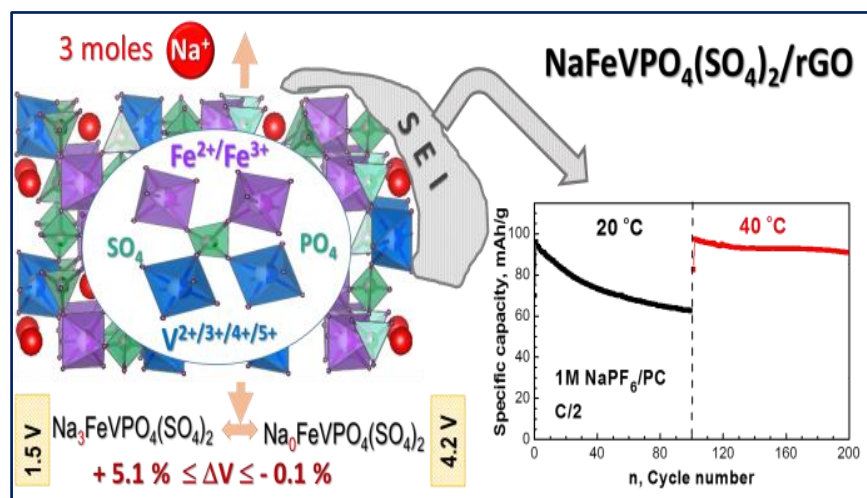
#### **ВОДЕЩА ОРГАНИЗАЦИЯ: ИОНХ - БАН**

#### **ПАРТНЬОРИ: 1. УНИВЕРСИТЕТ НА ГРАД КОРДОБА, ИСПАНИЯ**

#### **2. УНИВЕРСИТЕТ ИНЬОНЮ, ТУРЦИЯ**

#### **3. TÜBİTAK RUTE, ТУРЦИЯ**

В рамките на международния проект по програма M-ERA.NET на тема „Контрол на електродната повърхност за постигане на свръхвисок обратим капацитет (MASTER)” е предложен нов мултиелектронен катод на основата на полианионно съединение  $\text{NaFeVPO}_4(\text{SO}_4)_2$ , което съчетава в себе си разпространените елементи Fe и V, характеризиращи се с разнообразие от окислителни състояния, със стабилна смесена фосфатно-сулфатна структурна матрица. Този полианионен материал интеркалира обратимо 3 мола натриеви йони със специфичен капацитет от 175 mAh/g, което е съпроводено с минимално изменение на обема на кристалната решетка (до 5.2 %). След повърхностно модифициране с редуциран графенов оксид, смесеният фосфатно-сулфатен катод показва висок работен капацитет при високи токови натоварвания (около 90 mAh/g при C/2) и отлична циклична стабилност близка до 99 % при висока температура, като тези характеристики са едни от най-добрите, съобщени до момента, при близки по състав катодни материали. Отличните електрохимични характеристики на повърхностно модифицирания фосфатно-сулфатен материал се дължат на специфичния хибриден механизъм на съхранение на натрий. Чрез *ex-situ* анализи на циклирани електроди  $\text{NaFeVPO}_4(\text{SO}_4)_2/\text{rGO}$  е установено за първи път формирането на повърхностен филм на интерфейса електрод-електролит, чийто състав и дебелина зависят от потенциала и от температурата, при които протича електрохимичната реакция. Тези резултати дават нови насоки за фин контрол на електрохимичните свойства на полианионни електроди.



**Публикация:** V. Koleva, T. Tushev, S. Harizanova, R. Kukeva, M. Shipochka, P. Markov, R. Stoyanova, Multi-electron Redox Reactions with Iron and Vanadium Ions at a Mixed Phosphate-Sulfate Electrode during Sodium Intercalation, *Materials Advances*, **5**, 2024, 8599–8614. <https://doi.org/10.1039/D4MA00754A>, ISI IF = 5.2; Q1

#### 4. УЧАСТИЕ НА ИОНХ В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ

ИОНХ създава отлични условия за подготовка и развитие на научния потенциал на младите учени. Освен това активно участва и изпълнява **образователната програма с качествено и конкурентоспособно обучение на докторанти** в различни форми и образователни инициативи. Институтът разполага с квалифицирани учени, необходима апаратура, има опит и традиции. ИОНХ е акредитиран от НАОА (до 2026/2027 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 6 специализирани курса за докторанти (до 2026 г.).

През 2024 г., **двама докторанти** успешно защитиха дисертационните си трудове по докторски програми „Неорганична химия“ (Антонина Ковачева) и „Химия на твърдото тяло“ (Диана Кичукова). Темите на дисертациите им, са както следва „*Природни и моделни водни системи - експериментално изследване, термодинамично моделиране и практическо приложение*“, „*Синтез и изследване на редуциран графенов оксид и нанокomпозити с негово участие за приложение в катализа, електрохимията и биологията*“. Един докторант премина през етап предварителна защита на дисертационен труд (Олег Лагунов), а един докторант е в процес на обучение (Росица Кукева). Проведени бяха общо 14 конкурса за академичните длъжности „главен асистент“ (5 бр.) и „асистент“ (9 бр.).

Изготвени са три **дипломни работи** – две на студенти от ФХФ-СУ и една на студент от ХТМУ-София, на които учени от ИОНХ са съръководители. Две от тях са **магистърски тези** със съответните теми „*Приложение на рентгенофлуоресцентен анализ и прахова рентгенова дифракция за охарактеризиране на фосфатни катодни материали за натриево-йонни батерии*“ и „*Получаване на биовъглен за съхранение на енергия от отпадъчна биомаса и оценка на риска*“, както и **една бакалавърска** на тема „*Каталитично окисление на метан върху паладий-съдържащ катализатор за намаляване на емисиите от парникови газове*“. И трите са успешно защитени в съответните университети.

В Института се обучава един **специализант** по програма „Повишаване на иновационния капацитет на Българската академия на науките в сферата на зелените и цифровите технологии“ по Плана за възстановяване и устойчивост. По Националната програма „Млади учени и постдокторанти“-2 в ИОНХ се изпълняват два проекта – един в модул „Млади учени“ и един в модул „Постдокторанти“.

Четириима млади учени от ИОНХ (д-р Цветомила Лазарова-Кюлева, д-р Диана Кичукова, д-р София Славова и д-р Тина Дилова) изпълняват проекти по Конкурс за финансиране на Фундаментални научни изследвания на млади учени и постдокторанти към ФНИ.

**Осем млади** специалисти са привлечени за работа по проекти Вихрен от програмата ННП.

Реализирани бяха и **студентски практики** в рамките на проектите НИ – СЕВЕ, Вихрен и Бион е проведен обучителен стаж за двама студенти от ФХФ-СУ и ХТМУ (Георги Василев и Цветелина Герасимова). Със собствени средства на ИОНХ бе реализирано и обучение на един студент (Калина Михайлова) от ФХФ СУ „Св. Климент Охридски“.

Лаборатория „Интерметалиди и интеркалационни материали“ допринесе за практическото обучение на докторант Мате Кис от Университета в Сегед, Унгария, програма Еразъм към СУ ”Св. Климент Охридски”, върху ЕПР спектроскопията и нейното приложение за анализи на разтвори на метал-органични съединения. Практическото обучение бе извършено от ас. Росица Кукева.

Проведена бе и **ученическа практика** за ученици от две училища (ЧСУ „St. George International School & Preschool“ – София и ЧОУ “Образователни технологии” – София). При посещението им учени от Института презентираха наличната техника и оборудване на учениците, но и нагледно демонстрираха синтез на различни материали.

**Шест нови млади химици** започнаха работа в ИОНХ през 2024 г. Млади специалисти от ИОНХ (Трайче Тушев, Катерина Тумбалова, Стефани Петрова, Цветелина Герасимова) привлечени по време на Студентските практики, продължават работата си в ИОНХ и в резултат на успешна изследователска работа двама от тях (Катерина Тумбалова, Стефани Петрова) спечелиха годишните награди на Алма матер за учебната 2023/2024 г. за постижения в научноизследователската дейност.

Учен от ИОНХ е участвал в комисия по оценка и защита на постерни презентации при Национален младежки конкурс "Празник на химията 2024".

ИОНХ създава благоприятна среда за кариерно развитие на млади специалисти, в подкрепа на което е броят нови кадри привлечени за работа в Института, на които се предоставя възможност за работа със специализирана апаратура и да 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.

## 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;

➤ Иновационната дейност на ИОНХ през 2024 г. е свързана с външни организации и партньори (вкл. поръчана и договорирана с фирми от страната и чужбина) и 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 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 Solilug. Продължи основната работа на ССПР-Бургас по отношение разработки на иновативни продукти и технологии и организиране на малки производства на натурална медицинска козметика по поръчка на бизнеса. През годината са разработени и нотифицирани 3 нови продукта с нашата марка Black Sea Stars, 3 продукта по поръчка на фирма „Биоспер“ ЕООД с тяхна марка и 1 продукт по поръчка на фирма „Контеса БГ“ ЕООД с тяхна марка. Сключени са два нови договора – със словашката фирма „RENE SLEZAK 3RS“ и българската „УЕЛСПРИНГ“ ЕООД. 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 и "Козметикс България Профешънъл" ЕООД, „Лугестика“ ЕООД. ИОНХ е член на Сдружение GS1 България и Българска Национална Асоциация Етерични масла, Парфюмерия и Козметика. 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. Извършва се тестване и пилотни изследвания на технологии за химически продукти и реактиви, и за козметични и фармацевтични продукти, организиране на малки производства и проучване на пазара.

➤ Изследвани са нови монолитни и таблетирани катализатори за работа в инсталации за опазване на околната среда, производство на фирмата Халдор Топсо, Дания. Проведени са изпитания при условия, близки до тези в практиката, основно по отношение на устойчивост в присъствие на серен оксид, а така също и за постигане на високи степени на превръщане. Разработват се математични модели, предвиждащи поведението на реактори за пълно окисление на летливи органични съединения в отпадни газове. Разработват се методики за оценка на приложимостта на отпадни промишлени материали в процеси на улавяне на серен и въглероден диоксид.

➤ ИОНХ (Лаборатория ИИМ) развива иновативна дейност, свързана с международните фирми Cabot (САЩ) и Graphit Kropfmühl GmbH (Германия). Дейността се изразява в електрохимични изследвания на дългосрочни тестове в моделни електрохимични клетки при стайна температура.

## **6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ИОНХ**

**6.1. ССПР-Бургас** поддържа финансово (данъци, такси, застраховка, режимни, ремонти, др.) съществуването на Базата на Института в Бургас и се грижи за сградния ѝ фонд. В изпълнение на поръчки за фирми от страната и чужбина, през 2024 г. е реализирана продажба на обща стойност 696 828 лв (с ДДС), т.е. запазена е тенденцията на устойчивост от предишни години. През годината е ремонтирана изцяло металната конструкция на сградата на обща стойност 106 147,87 лв.

**6.2. Приходи от извършени анализи в областта на неорганичната химия-** рентгенови, ИЧ, Термични анализи, ТЕМ анализи, ДТА и др. са 108 019 лв., от които 35 095 лв са получени по изпълнение на договор с Кабот корпорейшън.

Извършени са анализи на контрагенти от страната: Булгартрансгаз ЕАД, Сика Б-я, МарсАрмор ООД, Чайка фарма Сенсата технолоджи ООД, Техкерамик М АД, Мелексис България – ООД Калцит АД, АД,Солво Трейд ООД, МЦ Уроелит, Вал Технолоджи ЕООД, Сдружение Тракея, Метакрозис ООД, МТГ Делфин, Агрополихим, Ронис ЕООД, Тракея ЕООД, Varite Maning ЕООД, Incolab Services, Reichle & De-Massari, РУА България ЕООД, Геплан ЕООД, Булминт Продъкшън ЕООД и Солво Трейд ООД.

## 7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ИОНХ

Финансовият анализ (по-долу) няма претенция за изчерпателност, а само представя тенденциите във финансовото състояние на ИОНХ. Подробна счетоводна справка се подава от счетоводителите към счетоводния отдел на БАН.

През 2024 г. приходите (в лв.) на ИОНХ се формират от:

<b>1. Бюджетна субсидия</b>		<b>4439753</b>	
Заплати и възнаграждения		3488753	
Издръжка		950000	
Годишен членски внос в Сдружение GS1 България и БНАЕМПК		1000	
<b>2. Други възнаграждения</b>		<b>1247630</b>	
нештатен персонал		14280	
по граждански договори		35204	
за неизползван отпуск		207	
за доп.тр.възнагр.по договори		1197939	
<b>3. Привлечени средства</b>		<b>2297030</b>	
<b>Разлика между получени и предоставени средства</b>		<b>1333674</b>	
<b>Получени</b>	<b>1980325</b>	<b>Предоставени:</b>	<b>646651</b>
ФНИ и МОН	1060840	СУ-възстановен остатък по договор с ФНИ	17719
БАН Администрация	97433	БАН Администрация	449277

ИП-БАН	26250	ИП-БАН	15000
ИЕЕС-БАН	182320	ИМК-БАН	164655
ИФХ-БАН	613482		
<b>Приходи и доходи от собственост</b>		<b>963356</b>	
приходи от продажба на продукция (с ДДС)		693828	
приходи от извършени анализи		76519	
<b>договори с чуждестранни фирми</b>		<b>193009</b>	
Халдор Топсо-Дания		157914	
CABOT CORPORATION		35095	

През 2024 г. ИОНХ е получил бюджетна субсидия в размер на 4 439 753 лв. и има привлечени средства в размер на 2 297 030 лв. Общо бюджетната субсидия и собствени приходи формират бюджет от 6 739 783 лв. и съотношението на собствените средства към тези на бюджетната субсидия е 34.10% към 65.90 %.

По бюджетна субсидия и финансов отчет, средната месечна брутна работна заплата за 2024 г. е 2 639 лв. За сравнение, тя е по-висока от миналогодишната средна месечна заплата (1 662 лв.). Благодарение на участието в мащабни проекти стана възможно през 2024 г. да бъдат изплащани и допълнителни трудови възнаграждения в размер на 1 197 939 лв. При средно допълнително заплащане от 907 лв., трудовите възнаграждения възлизат на 3 550 лв. За сравнение според Националния статистически институт, средната брутна работна заплата за второто тримесечие в сектор професионални дейности и научни изследвания е 3 110 лв., за София-столица е 3 128 лв. Плановата численост на ИОНХ-БАН към 31.12.2024 е 125 щатни бройки, незаети 9 бройки.

## 8. ИЗДАТЕЛСКА И ИНФОРМАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО

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 29.11.2023 г. (протокол № 158/29.11.2023 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	Радостина Константинова Стоянова	д-р Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Неорганична химия	ИОНХ- БАН
2	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
3	Антон Илиев Найденов	д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ- БАН
4	Константин Иванов Хаджииванов	дхн Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ Неорганична химия Аналитична химия	ИОНХ- БАН
5	Рени Стоилова Йорданова	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия Химия на твърдото тяло	ИОНХ- БАН
6	Михаил Йорданов Михайлов	д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ- БАН

7	Виолета Георгиева Колева	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ- БАН
8	Ивелина Мирчева Георгиева	д-р Неорганична химия	професор Теоретична химия	Теоретична химия Неорганична химия	ИОНХ- БАН
9	Диана Тодорова Рабаджиева	д-р Неорганична химия	професор Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ- БАН
10	Ивалина Аврамова Аврамова	д-р Физика на кондензираната материя	Професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Катализ Корозия Изследване на повърхности	ИОНХ- БАН
11	Иванка Петрова Спасова	д-р Химична кинетика и катализ	професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ- БАН
12	Кристина Костова Чакърова	д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ- БАН
13	Елена Здравкова Иванова	д-р Химична кинетика и катализ	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ	ИОНХ- БАН
14	Деяна Маринова Манасиева	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ- БАН
15	Геновева Борисова Атанасова	д-р Химия на твърдото тяло	Доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло	ИОНХ- БАН
16	Петър Цветанов Цветков	д-р Химия на твърдото тяло	Доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Кристалохимия	ИОНХ- БАН
17	Ели Георгиева Григорова	д-р Неорганична химия	доцент Неорганична химия	Неорганична химия	ИОНХ- БАН
18	Любомир Ивов Александров	д-р Химия на твърдото тяло	доцент Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло	ИОНХ- БАН
19	Албена Димитрова Бъчварова-Неделчева	д-р	доцент Неорганична химия	Неорганична химия Химия на твърдото тяло	ИОНХ- БАН

		Технология на силикатите, свързващите вещества и труднотопимите неметални материали			
20	Ралица Христова Велинова	д-р Технология на силикатите, свързващите вещества и труднотопимите неметални материали	доцент Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ Неорганична химия	ИОНХ- БАН
21	Тони Георгиев Спасов	дхн Химия на твърдото тяло	професор Химия на твърдото тяло	Химия на твърдото тяло Химична кинетика и катализ Физикохимия Неорганична химия	ФХФ- СУ
22	Мартин Славчев Божинов	дхн Физикохимия	Професор Физикохимия	Физикохимия	ХТМУ- София
23	Силвия ЖивоваТодорова	д-р Химична кинетика и катализ	Професор Химична кинетика и катализ	Химична кинетика и катализ, Хетерогенен катализ	ИК- БАН
24	Петър Димитров Петров	Дхн Химия на високомолекулните съединения	Професор Полимери и полимерни материали	Полимери Фотохимия	ИП- БАН
25	Боряна Рангелова 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	Нина Бойкова Стоянова - Нанкова млад учен с право на съвещателен глас	д-р Теоретична химия	Теоретична химия	Теоретична химия	ИОНХ- БАН
----	--	-------------------------	------------------	------------------	--------------

## **10. КОПИЕ ОТ ПРАВИЛНИКА ЗА РАБОТА НА ЗВЕНТО**

Линк <http://www.igic.bas.bg/документи/> - Правилник за устройството, дейността и управлението на Института по обща и неорганична химия при Българската академия на науките (последно актуализиран с Протокол №58/29.11.2023 г.).

## **11. СПИСЪК НА ИЗПОЛЗВАНИТЕ В ОТЧЕТА ИОНХ ЗА 2024 Г. СЪКРАЩЕНИЯ**

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“

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

IURAS 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

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

TXRF Total reflection X-rays fluorescence

ИИМ Интерметалиди и интеркалационни материали

XAS X-ray absorption spectroscopy

XRD X-ray Powder Diffraction

ДТА/ТГ Диференциално термичен анализ с термогравиметрия