

**ИНСТИТУТ ПО КАТАЛИЗ
БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ**

=====

**ИЗВЛЕЧЕНИЕ ОТ
ОТЧЕТЕН ДОКЛАД
за 2019 г.**



Януари, 2020 г.

УВОД

Институтът има заети общо 56 щатни бройки. Разпределението на служителите по категории е следното: професори - 7, доценти - 9, главни асистенти – 11.5, асистент – 1, научно-помощен персонал с висше образование – 11.5, администрация – 5, помощно-технически персонал – 4.5, помощно-обслужващ персонал – 6.5. Институтът разполага със сграден фонд, включващ бл.11, бл.12 и блок 104А, ул. Акад. Георги Бончев на стойност 546 872 лв., дълготрайни материални и нематериални активи на стойност 925 360 лв. (в т.ч. компютри – 51 014 лв., програмни продукти – 8 992 лв., машини и съоръжения – 862 592 лв., стопански инвентар – 2 762 лв.) и материални запаси на стойност 5 394 лв.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ЗВЕНОТО

1.1. Преглед на изпълнението на целите /стратегически и оперативни/ на звеното, оценка и анализ на постигнатите резултати и на перспективите на звеното в съответствие с неговата мисия и приоритети, съобразени с утвърдените научни тематики.

Институтът по катализ (ИК) е основен координатор, научно-изследователски, научно-приложен, иновационен център и център за подготовка на специализирани кадри в България и Югоизточна Европа по фундаментални и приложни изследвания в областта на хетерогенния, хомогенния и фотокатализ, химичната кинетика, химичната стабилизация и специфичните изследователски методи, приложими в катализа.

Научните изследвания, които се извършват в ИК като звено от научно направление 3 от структурата на БАН: „Нанонауки, нови материали и технологии“ са в съответствие с националните, европейските и световните изисквания за организация на научни изследвания, за осигуряване и поддържане на високо равнище на науката, интердисциплинарност на изследванията, международна конкурентоспособност и национално самочувствие.

В Института приоритетно се разработват научните основи за подбор на нови каталитични системи, работи се върху химичната стабилизация на органични материали, изследва се реакционната способност на органични съединения, развиват се методично и методологично методите на ЕПР спектроскопията, изучава се кинетиката и механизма на хетерогенни и хомогенни каталитични реакции, с квантово-химични методи се изучават каталитични превръщания на атомно ниво.

В ИК се разработват каталитични материали с регулирана структура и свойства за процесите за опазване на околната среда и подобряване качеството на живот, получаване на алтернативни горива – водород, оползотворяване на нови енергийни източници и др.

Широко приложение намират съвременните физични методи като: Рентгенова фотоелектронна спектроскопия, рентгеноструктурен анализ, инфрачервена спектроскопия, температурно-програмирана десорбция, редукция и окисление, диференциална сканираща калориметрия, Мьосбауерова и ЕПР спектроскопия и др.

Структурата на ИК включва 3 лаборатории с 11 тематични групи:

- **Нови хетерогенни катализатори за чиста енергия и опазване на околната среда**
 - Катализ за опазване на околната среда
 - Научни основи за синтез и подбор на хетерогенни катализатори
 - Нанесени метални катализатори
 - Синтез и активност на метални и метало-оксидни катализатори
- **Дизайн и охарактеризиране на каталитични материали**
 - Синтез и структура на катализатори и сорбенти
 - Анализ на повърхности
 - Център по ЕПР спектроскопия
 - Квантовохимични и теоретични изследвания на катализатори и каталитични процеси
- **Съвременни окислителни процеси**
 - Озонохимия и катализ
 - Фотокатализ и фотохромни съединения в катализа
 - Плазмени методи за синтез на каталитични материали

Основните научно-изследователски приоритети и направления в ИК са в тясна връзка с основните приоритети на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2017-2030 в Република България 2017 – 2030, Стратегията за развитие на БАН 2018-2030 и Иновационна стратегия за интелигентна специализация. Получените научни и научно-приложни резултати в ИК през 2019 г са пряко свързани с приетия научно-изследователски план за периода 2018-2020 г., включващ три основни научни направления:

- 1. Разработване на нови каталитични наноматериали и адсорбенти с предварително зададени свойства.**
- 2. Разработване на каталитични процеси и нови ефективни наноразмерни катализатори за получаване на чиста енергия и горива.**
- 3. Нови каталитични материали и процеси за подобряване качеството на живот.**

Първото научно направление включва две научни задачи.

Задача 1. Получаване на нови каталитични материали и адсорбенти посредством конвенционални методи.

- По проект с ФНИ „Формиране и еволюция на металната фаза в нанесени Co-Pd катализатори за хидрогенирането на СО. Изследване на връзката между съотношението на адсорбция СО/Н и селективността“ е установено, че от изследваните катализатори най-активни са тези нанесени върху SiO_2 и Al_2O_3 , предварително обработени във въздушна атмосфера и редуцирани при 300 °С. За тях е характерна значителна степен на стабилно адсорбиран СО (CO_s) с голям дял многоцентрова адсорбция, високо адсорбционно отношение $\text{H}_{100}/\text{CO}_s$ и голямо количество самостоятелни Со и Pd частици. Катализаторите показват ред на активност в конверсията на СО, различен от реда на селективност към CH_4 . При селективните катализатори, предварително обработени в H_2/Ar и редуцирани при 400 и 450 °С преобладава редуцираната форма на Со. При носител TiO_2 активни образци се получават при предварителна обработка във водород, а селективните – във въздух (редуцирани при 300 °С). Селективността на нанесени върху TiO_2 образци е по-ниска от тази при носители SiO_2 и Al_2O_3 .
- По проект “Мултифункционални катализатори за получаване на химикали” с Университет Гент, Белгия е получена серия Cu катализатори, промотирани с различно съдържание на Ni, за дехидрогениране на етанол до ацеталдехид. Установено е, че сплавяването на Cu с Ni води до повишаване на специфичната активност на катализатора, което е следствие от намаляване броя на активните Ni центрове, водещи до разлагане на ацеталдехида, съответно до образуване на кокс. Присъствието на водни пари по време на реакцията води до повишаване конверсията на етанол и стабилността на CuNi катализаторите, което е отдадено на намаляване отлагането на въглерод на повърхността на катализатора.
- В съответствие с предмета на рамковия „Техкерамик М“ АД, Мездра договор, предвидените дейности са извършени и отчетени с представени експертизи за проведени анализи. Те нямат фундаментален характер, а са от технологично естество и са показателни за спазването на утвърден технологичен регламент. Резултатите представляват стопанска и фирмена тайна.
- По договор „Аноди на алкални електролитни клетки на база неблагородни метали“ с израелската фирма GenCell Ltd, Петах Тиква, е синтезиран катализатор на база никел с добавки от преходни метали. Резултатите са в процес на патентоване (Заявка за патент № 6250-V50510, Nickel-based catalyst for fuel cell anode, N. Borchtchoukova, Y. Wijsboom, G. Finkelshtain, D. Nikolova, M. Gabrovska). Проведени са изследвания във връзка с избора на най-подходящ състав, който да показва електрохимична активност и продължителност на работа, еднаква с вече внедрения в редовно производство от работния колектив никелов катализатор. Разработва се технология за преминаването от лабораторен към промишлен синтез.
- По проект „Смесени оксиди с подобрен състав като носители на наноразмерни метални катализатори“ с ИФХ, РА, е извършено модифициране на NiAl слоест двоен хидроксид с CeO_2 , чрез утаяване на $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ с NaOH върху суспендиран NiAl. Изследвана е

стабилността на NiAl в алкална среда и условията на утаяване при промяна концентрацията на утайателя. Извършено е модифициране с 1, 3 и 5 тегл. % CeO_2 на NiAl, използван като носител на наноразмерни преходни метали, катализиращи реакцията на конверсия на CO с водна пара.

- По проект „**Синтез и свойства на каталитични материали за опазване на околната среда**“ със Сръбска академия на науките и изкуствата са проведени експерименти за осъществяване на екологично чист и възпроизводим биосинтез на каталитични материали за почистване на отпадни води, базирани на наноразмерни частици на преходните метали чрез използване на растителни екстракти и съответните соли. В зависимост от използваният екстракт, при едни и същи изходни съединения, се получават образци с различен фазов състав. Синтезираните наноразмерни Fe-Me (Me = Co, Ni и др.) оксидни или оксихидроксидни материали са изследвани за почистване на отпадни води, замърсени с бои от текстилната промишленост. Анализите са направени в тест-реакцията на разлагане на багрилото Метилоранж.
- Изследванията по проекта с ФНИ „**Каталитични приложения на зеолити, синтезирани от въглищна пепел**“ са опит за намиране на решение на екологични проблеми като оползотворяването на отпадъците от въглищна пепел едновременно с намаляването на емисиите от CO. Зеолит X от пепел се получава и се използва като носител на катализатор, което води до минимизиране на цената на катализатора. Катализатори, получени чрез нанасяне на платина върху получените зеолитни образци, са изследвани в реакцията на окисление на CO. Температурната разлика за 100% конверсия на CO между двата носителя, синтезирани съответно от въглищна пепел и чисти химикали, е само 20 °C, а когато се нанесе железен оксид върху носителя, синтезиран от чисти химикали за да е по-точно сравнението между двата носителя, тогава няма разлика в температурата на достигане на пълна конверсия на CO. Тези резултати са обещаващи за намиране на евтин носител и на по-евтина алтернатива за синтез на зеолит X за каталитични цели.
- По проект „**Зеолит-полиимидни хибридни материали със зададени свойства**“ с Институт по макромолекулярна химия, гр. Яш, Румъния са изследвани антимикробните свойства на хибридни зеолит-полимерни материали, при които зеолита е йоннообменен със сребърни йони. Среброто е метал, който действа върху широк спектър от бактерии, като променя метаболизма им. Той може да унищожи или инхибира растежа на микроорганизми и патогенни микроорганизми при ниска концентрация. Синтезирани са различни полимерни нанокомпозиции с Ag-наночастици и е оценена тяхната антимикробна активност.
- По проект „**Устойчиви катализатори на базата на зеолити за окислителни реакции**“ с ФНИ - Двустранно сътрудничество, Индия са синтезирани Al-ZSM-5 и Ga-ZSM-5 зеолити от системи, съдържащи тетрапропиламониев бромид като темплейт. За получаването на чисти фази, условията на кристализация и за двете системи са оптимизирани чрез различни реакционни параметри. Установено е, че получените материали имат висока кристалност и в тяхната структура се създават нови мезопори, чиито обем се увеличава с до 67% спрямо двете изходни проби. Резултатите от FTIR изследването анализа на нискотемпературна адсорбция на CO и ЯМР спектроскопия в твърдо състояние показват, че третирането е селективно към разтваряне на хетероатома в решетката на зеолитите (алуминий или галий). За да се следи влиянието на вида на металния атом и ефикасността на третирането с киселина върху каталитичната активност, получените проби се тестват в реакция на трансформация на *m*-ксилен.

- По проект „**Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита**“ - Е+: Разработени са катализатори за следните последователни процеси:

Получаването на чист водород чрез:

-Каталитичен реформинг на биогаз. Катализаторите са на основата на Ni, нанесен на хидроталкитни структури. Изследвано е и влиянието на добавка от благороден метал.

-Конверсия на CO с водна пара. Установено е, че злато-съдържащ катализатор, нанесен на слоест двоен хидроксид с по-ниско съдържание на никел (Au/Ni-Al 2.5) е активен и рентабилен при получаване на чист водород. Равновесна степен на превръщане на CO (97.6 %)

е постигната при 240 °C, позволявайки протичането на процеса на конверсия само в един етап и намалявайки експлоатационните разходи.

-Селективно окисление на остатъчния CO. Получени са активни и стабилни катализатори на основата на сребро, модифицирано с церий и носител SiO₂. Високата активност е резултат от формирането, в присъствието на цериевия диоксид, на: по-активни в реакциите на окисление повърхностни и подповърхностни кислородни форми; по-висока дисперсност и по-равномерно разпределение на сребро по повърхността; формирането на суперпарамагнитни частици [Ag-O]; [Ag-O] n клъстери.

- **Улавяне на CO₂.**
- Изследвана е адсорбцията на CO₂ върху зеолит FANaX (FA – fly ash), синтезиран от въглищна пепел и референтен зеолит NaX, синтезиран от чисти химикали. Адсорбцията е извършена при температури от 35, 100 и 250°C. Установено е, че улавянето на CO₂ от FANaX-пепел и NaX-чисти химикали е сравнимо, особено когато адсорбцията се извършва при 35 и 100 °C, последвано от десорбция в диапазона 35-350 °C. Когато се извършва адсорбция при 250 °C, се установява по-голямо количество CO₂, уловено от FANaX-пепел, отколкото тези от NaX-чисти-химикали. Този факт показва, че синтезираният от въглищна пепел образец е по-подходящ за топло улавяне на CO₂, в сравнение с референтния образец, въпреки че специфичната повърхност на NaX-чисти химикали е по-висока от тази на FANaX-пепел. Този факт може да се обясни с наличието на MgO като примес във въглищната пепел, който остава и се съдържа в синтезиания зеолит. Това е пример за евтин сорбент на CO₂ с висока ефективност, синтезиран от отпаден продукт.
- **Разработване на концепция за подобряване на каталитична активност на електродите за елиминирание недостатъците на класическата керамична технология при изготвянето на електродите:**
Извършена е оптимизация на лабораторната технология за получаване на Ni-базирани керамични аноди с приложение в протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки при използването на анодна керамична матрица протон-проводящия електролит итрий-дотиран бариев церат (BCY15). Установено е, че синтезианият в безводна среда аноден кермет показва добра фазова стабилност, подобрена проводимост и електрохимични характеристики, в сравнение със синтеза във водна среда. Модифицирането с Cu допринася за запазване на анодната керамичната матрица без образуване на паразитни фази при високотемпературното синтероване, облекчена редукция на формирания NiO до метален никел, относително по-дребни по размер метални никелови частици и подобрена електронна проводимост, измерена чрез електрохимична импедансна спектроскопия.
- По проект “Синтез на оксидни материали с приложение във фотокатализа” е тествана фотокаталитичната способност на CeO₂-ZnO материали при разграждане на багрилото Реактивно Черно 5 (PЧ5) като моделен замърсител във воден разтвор под действието на УВ светлина. Установено е, че фотокатализаторът CeO₂-ZnO, получен при използване на по-малко количество от Плуроник P123, демонстрира по-висока степен на разграждане на PЧ5 багрило при УВ облъчване. Фотокаталитичното поведение е изследвано при разграждане на багрилата Малахитово зелено (МЗ) и PЧ5 багрила във водни разтвори под действието на УВ облъчване. Установено е, че недотираната проба демонстрира по-висока фотокаталитична способност за разграждане на МЗ в сравнение с PЧ5. Дотирането със сребро повишава фотокаталитичната способност на образца Ce-Zn-La оксиди за разграждане на багрило PЧ5 (78%) при 150 минути УВ облъчване в сравнение с тази при недотираната проба (52%).

Задача 2. Приложение на квантовохимични методи в катализа.

- С помощта на разработения подход за пресмятане на термодинамичните свойства на кристални системи в рамките на теорията на функционала на плътността и квази-хармонично

приближение за термичните кристални свойства е изследвана реакцията на превръщане $\text{MgH}_2 \rightleftharpoons \text{Mg} + \text{H}_2$. Като приложение на разработения подход са построени фазовите диаграми на реакцията на обратимо превръщане на магнезиеви хидриди $\alpha\text{-MgH}_2/\beta\text{-MgH}_2/\gamma\text{-MgH}_2/\varepsilon\text{-MgH}_2 \rightleftharpoons \text{cubic-Mg/hcp-Mg} + \text{H}_2$ и са пресметнати термичните и термодинамични свойства за тази система.

- В рамките на разработен модел за пресмятане на свойствата на магнезиеви хидриди са определени параметрите на силово поле 'MEAM' имплементиран в програмния пакет LAMMPS.
- Проведен е курс за обучение на млади научни сътрудници и докторанти, **„Въведение в компютърната химия I - Моделиране на молекулни системи”** (30 часа) с 8 участника, двама от Университет „Проф. д-р Ас. Златаров“ - Бургас, един от ХМТУ-София, един от Институт по механика, БАН, двама от Институт по катализ, БАН и двама от Институт по обща и неорганична химия, БАН. Основна цел на курса от лекции и практически упражнения е да бъдат въведени и приложени нови комплексни методи за теоретична симулация на молекулни системи с цели в областите на интерес на участниците.
- През изтеклата 2019 година продължи разработката на принципа на “boundedness”, въведен в излязлата от печат през 2012 година авторска монография на Мария К. Колева “Boundedness and Self-Organized Semantics: Theory and Applications” IGI-Global, САЩ. Въведено е ново понятие за самоорганизация, чието главно свойство е, че позволява осъществяването на семантичната интелигентност чрез спонтанно осъществявани физико-химични процеси. Най-важното свойство на този нов тип самоорганизация е, че реализацията на причинно-следствените връзки се осъществява чрез всеки един от индивидуалните отклици, характеризиращи дадена реализация на семантичната интелигентност. Важно достойнство на така въведената самоорганизация е, че тя се осъществява в непрекъснато променяща се среда.

Изследванията по **второто** научно направление са обединени в две задачи:

Задача 1. Каталитични материали за получаване на водород от природни и възобновяеми енергийни суровини.

- По проект **“Получаване на алтернативни горива от възобновяеми въглерод-съдържащи суровини”** по междуакадемично сътрудничество с Испания е получена серия биметални CoNi катализатори с различно съотношение на металните компоненти за сух реформинг на метан. Намерена е корелация между фазов състав, електронна структура и каталитични свойства на изследваните катализатори. Установено е, че добавянето на малко количество Co към Ni/Al води до висока каталитична активност и стабилност, което е отдадено на по-добрата редуцируемост на никел оксидни съединения и високата дисперсност на металните никелови частици.
- По проект **„Дизайн и приложение на метало-оксидни системи”** са разработени активни Ni-Al катализатори за среднотемпературна конверсия на въглероден оксид с водна пара (КВОВП), получени от слоести двойни хидроксида. Установено е, че нанесено злато върху Ni-Al слоест двоен хидроксид представлява ефективен катализатор за получаване на чист водород чрез КВОВП. Потвърден е реакционният механизъм на протичане на КВОВП, включващ редокс преход $\text{Ni}^{2+} \leftrightarrow \text{Ni}^{3+}$ на повърхността на катализатора, придружен от адсорбция и активиране на CO върху златните частици.

Задача 2. Разработване на каталитични материали за очистване на водород за горивни клетки.

- По проект **“Разработване и охарактеризиране на нови активни и рентабилни катализатори за получаване на чист водород”** с Полска академия на науките, са синтезирани смесени оксиди със състав 30 т.% CeO_2 нанесен на $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ чрез импрегниране или механично смесване и са използвани като носители на медни катализатори. С цел изследване на модифициращата роля на итриевите йони е добавен и Y_2O_3 (1 т.% по

отношение съдържанието на CeO_2). Изучено е каталитичното поведение в реакцията на конверсия на CO с водна пара (КВОВП). За изясняване на връзката между текстурни, структурни, електронни, редукионни и каталитични свойства е проведено задълбочено физико-химично охарактеризиране. Получените до момента резултати от сравнително изследване разкриват благоприятното влияние на метода на механично смесване за модифициране на алуминиев оксид с CeO_2 , както и на добавката от Y_2O_3 върху активността в реакцията на КВОВП на получените върху тези носители медни катализатори.

- В резултат на проведените изследвания по проект **„Волфрам-, молибден-, рений-съдържащи катализатори за получаване на водород от сяросъдържащи газове: синтез, модифициране и каталитични свойства“**, е направена оценка на стабилността на образуваните активни сулфидни и оксисулфидни структури при сулфидни Mo -, W - и Re -базирани катализатори при една и съща повърхностна плътност на основния компонент под влияние на окислителните реагенти като водна пара и CO_2 . Установено е, че в отсъствие на сяра в реакционната смес и реакционна температура 400°C , KCoMo - и KCoRe - катализаторите са по-стабилни и притежават възпроизводима активност, което е показател, че по време на конверсията на въглероден оксид с водна пара не са настъпили значителни физикохимични промени в активните структури на повърхността на катализаторите.
- По проект **“Корелация между йонна проводимост и редуцируемост на Au и Cu катализатори, нанесени на дотиран цериев диоксид: температурно програмирана редукция и измервания на електропроводимостта”** с ИФХ на РА, за изучаване на връзката между редуцируемостта, йонната проводимост и каталитичната активност в реакцията на конверсия на CO с водна пара (КВОВП) на медни катализатори нанесени на модифициран с различно количество Y_2O_3 (1.0, 2.5 и 5.0 т.%) цериев диоксид, е сравнено редукионното поведение на образците преди и след каталитична работа. Експериментално получените сложни ТПР профили са разложени на отделни пикове, съответстващи на протичащите редукионни процеси. Обработката на профилите е на основата на оценка на кинетичните параметри на редукцията по алгоритъм, разработен от румънските колеги. Съдържанието на кислородни ваканции, които са част от активните места за протичане на реакцията на КВОВП, е оценено с помощта на Раманова спектроскопия, прилагайки и сравнително новия метод на UV резонансна Раманова спектроскопия за сравнение на повърхностните кислородни ваканции, които са от интерес за катализа.
- По проект **„Интегриран подход за получаване на чист водород с оползотворяване на парниковия газ CO_2 “**, финансиран от ФНИ са получени са монометални и биметални PdNi съдържащи хидроталкитни катализатори за реформинг на метан с въглероден диоксид. Изследван е методът на нанасяне на металния компонент (чрез импрегниране или съутаяване) върху структурата, повърхностните и каталитични свойства на катализаторите. Установено е, че високата активност на монометален Ni катализатор, получен чрез импрегниране, се дължи на по-доброто разпределение на никеловите частици със среден размер от 7 nm на повърхността му. Изследвано е влиянието на метода на получаване на смесени Ce-Al оксиди върху каталитичната активност на синтезираните върху тях злато-съдържащи катализатори в реакцията на конверсия на CO с водна пара. С цел намаляване количеството на скъпо струващи редкоземни метали и запазване на голям брой активни центрове са приложени методите на импрегниране или механично смесване за формиране на високодисперсен цериеводиоксиден слой на повърхността на Al_2O_3 . Изучена е ролята на различно количество CeO_2 (10, 20 и 30 т.%), както и на модифицирането на CeO_2 с Y_2O_3 върху каталитичното поведение. Резултатите от сравнително изследване разкриват, че полученият чрез механичното смесване носител, съдържащ 30 т.% цериев диоксид с

добавен Y_2O_3 е подходящ материал при разработването на активни и икономически изгодни катализатори за получаване на чист водород.

- По проект „Разработване на нови активни и рентабилни катализатори за процес за получаване на чист водород, интегриран с оползотворяване на CO_2 “ с Институт по наноматериали, Палермо, Италия, е изследвано влиянието на различното атомно отношение Cu/Mn (2:1 или 1:5) в нанесени на алуминиев оксид смесени Cu-Mn оксиди и ефекта от нанасянето на злато върху активността в реакцията на селективно окисление на CO в богата на водород среда. За разлика от каталитичното поведение в реакцията на КВОВП, където злато-съдържащите катализатори показваха висока активност благодарение на промотиращата роля на нанесените златни наночастици при разлагане на Cu-Mn шпинелна фаза и формирането на фаза от финодисперсна и устойчива на агломерирание метална мед по време на реакцията, е установено, че в редукиционната среда на реакцията на селективно окисление се формират злато-медни сплави, които оказват неблагоприятен ефект върху окислителната активност.

Научните изследвания по научно направление 3 от научно изследователския план за 2018-2020 г. „Нови каталитични материали и процеси за подобряване качеството на живот“, обединява следните задачи:

Задача 1. Катализатори за частично хидрогениране на растителни масла и технология за получаване на висококачествени втвърдени масла.

- По проект „Слоести системи – прекурсори на наноразмерни катализатори за получаване на чисти горива и здравословни храни“ са получени суровини за CaO-съдържащи катализатори за получаване на биодизел посредством транс-естерификация от слънчогледово масло с висока активност, достъпност и ниска цена чрез поетапно термично активиране на сурова и рехидратирана яйчена черупка. Изследван е ефектът от количеството сребро върху способността на никела да консумира водород като начин за представяне активността на катализаторите в процеса на хидрогениране на растителни масла. Установено е, че модифицирането чрез съутаяване с най-високо съдържание на сребро (0.1, 1 и 4%) води до получаване на ефективен съутаен Ag-MgNi/SiO₂ катализатор за хидрогениране на слънчогледово масло (Mg/Ni = 0.1 и SiO₂/Ni = 1.15).
- По проект „Решения за критични суровини, използвани в материали, работещи при екстремни условия“, COST Акция OC-2015-1, работата е свързана с подобряване на сътрудничеството между участващите научни и технологични екипи от различните страни-участнички с цел решаване на конкретни иновативни задачи за заместване на критичните материали при разработването на активни катализатори. Участието на представител на страната в ръководството на COST акцията, който е от състава на ИК-БАН, допринесе за повишаване на квалификацията на младите изследователи и подобряване на възможностите за успешната им научна кариера чрез участието им в две работни срещи по проекта проведени в Рига и Букурещ и чрез подготовка и провеждане на училище по проекта в Краков и Полша. Проектът е добър пример за силни български позиции в COST акция с участие в ръководството му и с пряката ангажираност с повишаване на квалификацията на младите изследователи и подобряване на възможностите за успешната им научна кариера чрез подготовка и провеждане на училище по проекта в Краков, Полша. Участниците в проекта повишиха познанията си за най-новите постижения в науката за решаване на важни за европейската икономика въпроси като рециклиране и повторно използване на критичните суровини за създаване на устойчиви решения и циркулярна икономика. Проектът е добър пример за силни български позиции в COST акция. Подготвен е нов научно-приложен проект за кандидатстване по конкурс COST Innovators' Grant (CIG). Проектът има пряка връзка с приоритетите в областта на научните изследвания и иновациите.
- „Решения за критични суровини, използвани в материали, работещи при екстремни условия“, Договор ДКОСТ 01/22 от 08.12.2017, съфинансиране по COST акция CA 15102.

Проведени са серии от паралелни изследвания на ролята на различни критични материали с високотехнологичните свойства на магнитни материали – аморфни метални стъкла. В резултат на проведените *ex situ* и *in situ* анализи са установени температурните трансформации на тези материали в зависимост от съдържанието на критични суровини и условията на нагряване. Проведени са начални изследвания за фотокаталитично почистване на отпадни води с използване на отпадъчни материали – аморфни метални стъкла, съдържащи различни критични суровини.

Керамичните катализатори като устойчиво решение за предизвикателствата, свързани с критичните суровини: Проведени са серия изследвания по намиране на условия за получаване на нанесени наноразмерни феритни частици, които са алтернатива на катализаторите, съдържащи критични материали (главно метали от платиновата група и от групата на редкоземните елементи, Cr, Co, Si и др.) с приложение като катализатори за опазване на околната среда. Използвани са методите на импрегниране и мокра химия за получаване на целевите нанесени съединения и са тествани серия от носители с различна порьозност. Проведени са каталитични тестове за приложение на тези материали за разлагане на летливи органични компоненти в отпадни газове.

- По проект **„Комплексно изследване на фини прахови частици в атмосферата чрез лидарно локализиране на време-пространственото им разпределение, характеризиране по състав, структура, морфология и микробно съдържание“** с ФНИ е изследвано замърсяването с фини прахови частици (ФПЧ) на въздуха в град София в места с интензивен трафик: бул. „Цариградско шосе“ - района до „Технологичен парк София“ и пл. „Орлов мост“, както и бул. „Драган Цанков“ - Биологически факултет на СУ. Физикохимичното характеризиране на ФПЧ показва висока хетерогенност и комплексност на материалите, което силно затруднява тяхното отнасяне и идентифициране на специфичните регионални и трансгранични източници на замърсяване на въздуха. Въз основа на проведен анализ на ФПЧ, събрани в района на пл. „Орлов мост“, е направен опит за изработване на методология за систематичното им изследване. Детайлна информация за изследваните ФПЧ е получена въз основа на Мьосбауеровия анализ, прахова рентгенова дифракция и ФЕС, което позволи при използване на резултати от предходни анализи и литературни данни да бъдат идентифицирани някои от основните замърсители на въздуха в София. За целите на проекта е стартирано изследване на ФПЧ в пепели от отоплителни системи, като един от най-големите източници на ФПЧ за България (по данни на Министерство на околната среда и водите на България).

Задача 2. Приложна и фундаментална ЕПР спектроскопия

- По проект **„ЕПР дозиметрия“** са изследвани различни видове захариди като дозиметри за ниски (клинични) дози < 20 Gy - сред тях арабиноза, галактоза, лактоза, сорбоза, трехалоза и захароза. Приготвени и изследвани с ЕПР спектроскопия са цилиндрични дозиметри с диаметър 4 mm и височина 10 mm, съдържащи 60% от съответния захарид и 40% парафин. От облъчените прахообразни проби са приготвени и изследвани с УВ спектрометрия 5%-ни водни разтвори. Всички захариди показват характерни ЕПР спектри, които са стабилни за определен период от време. По отношение на УВ спектрометрията са наблюдавани абсорбционни линии при дължини на вълните 267 nm (захароза) и 278-280 nm (лактоза, галактоза, сорбоза), за останалите захариди не се регистрира абсорбционна линия, вероятно поради ниската доза на облъчване. Резултатите показват, че дизахариди (лактоза, трехалоза и захароза) имат по-добри свойства като дозиметрични материали за ниски дози в сравнение с монозахариди (сорбоза, арабиноза и галактоза).
- По проект **„ЕПР анализ на хранителни продукти“** са изследвани необлъчени и облъчени с 2, 5, 10 и 20 kGy натурален прополис, лиофилизиран прополис и пчелен восък. Във всички проби се регистрира ЕПР спектър от йони на Fe^{3+} и Mn^{2+} в относително големи концентрации. Гама-лъчите индуцират свободни радикали единствено в облъчените с 10 и 20 kGy проби от натурален и лиофилизиран прополис, които рекомбинират в рамките на три месеца. При

пчелен восък не се наблюдава разлика между необлъчени и облъчени проби. Изследван е ефектът от гама облъчване на лиофилизиран пчелен прашец с 0, 2, 5 и 10 kGy върху антирадикаловата му активност, посредством метода на ЕПР спектроскопия, използвайки стабилния свободен радикал 1,1-дифенил-2-пикрилхидразил (DPPH). Изчислени са процентите уловени DPPH радикали от екстракта на пчелния прашец (с различни концентрации). За охарактеризиране и сравняване на антиоксидантната активност на екстрактите е определен параметърът IC_{50} , както и антиоксидантният капацитет на пробите спрямо Тролокс еквивалент.

- Проект **„ЕПР в катализа“**. ЕПР спектроскопия е използвана за охарактеризиране на различни каталитични материали. Изследвани са материали съдържащи паладий, лантан, титан, кобалт, церий, мед, злато, сребро, итрий, цирконий и др. Изследвани са както свежи образци, така и тествани в каталитични реакции на пълно окисление на метан, пълно окисление на бензен, конверсия на въглероден оксид с водна пара и др. Използвани са различни методи на синтез на катализаторите както и различни условия на третиране. Изследвани са и H-Beta зеолити, модифицирани със сребро, TiO_2 чист и дотиран с различни концентрации P_2O_5 , ZrO_2 чист и дотиран с полиетилен гликол, съвместно с колеги от ИОНХ. ЕПР спектрите са регистрирани при температури от 295 K до 123 K. В резултат на ЕПР анализа е определено окислителното състояние на металните йони в изследваните вещества и начина, по който взаимодействат с обкръжаващата ги среда, което е полезно за обясняване на каталитичната им активност.
- По проект **“Комплексен подход за оценка на промените в биологично-активни вещества и антиоксидантния потенциал на облъчени растителни храни и билки. Нови протектори срещу гама-облъчване”**, финансиран от ФНИ, е изследвана на кинетиката на затихване във времето на радиационно-индуцираните свободни радикали в лешник и фъстък. Измервани са по две паралелни проби от всеки вид ядки всяка седмица в продължение на 5 месеца, след което веднъж на две седмици още 5 месеца. Наблюдава се постепенно намаляване на интензитета на радиационно-индуцираните сигнали, като и при двата вида ядки централната линия намалява своя интензитет около 90%, докато сателитните линии с 83 и 87% съответно за лешник и фъстък. Не се наблюдава значителна разлика в кинетичните криви на двете различни дози на облъчване (10 и 25 kGy). С метода на ЕПР спектроскопия е изследван ефектът от гама-облъчване на фъстък и лешник с дози от 10 и 25 kGy върху радикалуващата им активност в първите няколко часа след облъчване и шест месеца след това. Резултатите показват, че антирадикаловата активност на облъчените фъстъци и лешници с 10 kGy намалява в сравнение с необлъчената проба и остава непроменена шест месеца след облъчване. При пробите облъчени с 25 kGy антирадикаловата активност продължава да намалява дори шест месеца след облъчване.

Задача 3. Синтез, стабилизация и деструкция на органични и полимерни съединения.

- По проект **„Кинетика и механизъм на реакции на озон с органични полимерни съединения-озонна деструкция и стабилизация“** е изследвана абсорбцията на озон от разтвори на циклохексанол по време на озонлизата им в барботажен реактор посредством непрекъснато измерване на концентрациите на озона на изход, в условията на постоянни стойности на съответните концентрации на вход в реактора. Определени са стойностите на скоростната константа (25 °C) и активиращата енергия на реакцията съответно $3.1 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ и 10.2 kcal/mol . Пиковите при 1710 , 1724 и 1776 cm^{-1} в ИЧ спектрите на озонирания разтвор са използвани за охарактеризиране на скоростите на натрупване на съответните киселинни, кето- и естерни функционални групи. Определено, посредством ГС/МСД анализ, количествено съотношение (циклохексанон + циклохексанон, 2-хлоро)/естери е 53/47. Установено е, че количеството на основния естерен продукт - дициклохексилов естер на адипиновата киселина е около 37% от общия добив на естерите.
- По проект **„Синтез и изследване на молекулни и супрамолекулни устройства на основата на спиронафтоксазини, хромени и стирилови багрила“**, ФНИ, Двустранно сътрудничество с Русия е синтезирано и охарактеризирано ново фотохромно съединение от

спиронафтоксазинов тип, съдържащо сулфобутилов заместител в индолиновата част на молекулата. Изучени са фотохромните му свойства и комплексообразуването му с метални йони. Безцветната спиро форма на синтезираното съединение е стабилна в разтвор на ацетонитрил на тъмно, но при взаимодействието с Cd^{2+} , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} или Pb^{2+} Mg^{2+} се образуват стабилни комплекси с отворената мероцианинова форма на съединението. Стойностите на активиращата енергия на процеса на оцветяване на тъмно не зависят от природата на металните йони, тъй като скоростопределящ етап на комплексообразуването е отварянето на спирооксазиновия пръстен. Съотношението между затворената форма и свързаната в комплекс отворена мероцианинова форма може да се контролира чрез облъчване със светлина с различна дължина на вълната. При облъчване с $\lambda = 640 \text{ nm}$ концентратията на комплекса в разтвора намалява, което се дължи на образуването на затворена спиро форма SP1, докато облъчването с $\lambda = 365 \text{ nm}$ води до увеличаване концентрацията на свързаната в комплекс мероцианинова форма.

Задача 4. Каталитични системи за почистване на отпадъчни газове, замърсени почви и отпадъчни води.

- По проект „Наноразмерни оксиди с контролиран размер и морфология модифицирани с благородни метали (Pt, Pd, Ru) за процеси на почистване на газове (пълно окисление на летливи органични вещества и PROX процес)“ ФНИ, ИНДИЯ са получени наноразмерни смесени оксиди CoMn_2O_4 , Co_2MnO_4 , $\text{Co}_3\text{O}_4\text{-CeO}_2$, които са тествани в реакции на пълно окисление на ЛОС и СО. Синтезираните по обратно мицеларен метод $\text{Co}_3\text{O}_4\text{-CeO}_2$ образци, показаха изключително висока активност и стабилност в окисление на СО в широк интервал от обемни скорости (10000 до 800000 h^{-1}).
- По проект „Ефект на добавката от лантаноиди и метода на синтез върху свойствата на Pt/мезопорести оксиди в окислителни реакции“ ИФХ, Румъния са изследвани катализатори на основа на SBA-15, модифицирани с Pt, Ti и Ce в реакциите на окисление на СО, метан, пропан и *n*-хексан. Активността в окисление на метан се увеличава с нарастване размера на платиновите частици. Добавянето на Ce в системата намалява активността. Допълнително намаляване се получава в случаите, когато Ce е нанесен след нанасяне на платина. При окисление на СО, катализаторите модифицирани с Ce, показаха по-висока активност, независимо от последователността на внасяне на церия. Изследванията с инфрачервена спектроскопия дават основание да се предположи, че реакцията на окисление на СО при температури до 250 °С протича по механизъм на Ленгмюир-Хиншелууд, включващ линейно свързани молекули на въглеродния оксид с Pt^{2+} .
- По проект „Разработване на нови каталитични системи на основата на смесени оксиди ($\text{Co}_3\text{O}_4\text{-MeO}_x$, Me = Mn, Ce) нанесени на йерархични макро-мезопорести и мезо-мезопорести силициевы материали“, ФНИ, Двустранно сътрудничество с Франция. Разработени са нови високо активни и стабилни катализатори за пълно окисление на летливи органични съединения и СО, посредством модифициране на йерархичен наноструктуриран макро-мезо- или мезопорест силициев оксид с оксиди на преходни метали (MnO_x , Co_3O_4) или комбинация от тях, както и оксиди на преходни метали дотирани с CeO_2 . Силно развита повърхност на мезопорестите и макро-мезопорестите носители благоприятства формирането на финодисперсни частици от активната фаза и предотвратява агломерацията им. Силно развита мрежа от канали благоприятства дифузията на реагентите до каталитично активните центрове.
- По проект „Фотокаталитично почистване на замърсени води и въздух с помощта на наноструктурирани материали“, ФНИ, Двустранно сътрудничество със Словакия са получени наноструктурирани материали: циркониев диоксид дотиран с азот, цинков окис дотиран с азот, цериев диоксид съдържащ сребро, ZnSe-TiO_2 композит, медно-железен сулфид CuFeS_2 и $\text{CuFeS}_2\text{-TiO}_2$ композит чрез механохимичен синтез във високоенергийна топкова мелница. Като източник на азот е използван амоняк или карбамид, а тиокарбамидът е използван като източник на сяра. Получените материали са охарактеризирани с рентгенофазов анализ, дифузноотражателна спектроскопия, инфрачервена и Мьосбауерова спектроскопии и

електронен парамагнитен резонанс. Тестването на фотокаталитичната активност на катализаторните образци за очистване на моделни отпадни води е проведено с моделни замърсители – багрилото Метилоранж, Родамин Б, както и разграждането на тетрациклин и ципрофлоксацин, а за очистка на въздух - с моделен замърсител етилен. Изучен е реакционният механизъм и е направен анализ на получените продукти.

- По темата **„Фотокатализ и УОП“**, прилагайки метода на Тагучи за последователно планиране на експеримента варирайки 6 входящи параметъра на 5 нива, броят на експериментите е сведен вместо $6^5=15\,625$ опита само на 32 експеримента. Въз основа на получените данни е установено, че най-голям принос имат интензитета на осветяване (55%) и скоростта на разбъркване на реагентите в реакционната смес (35%). Количеството на фотокатализатора играе по-малка роля, тъй като при увеличаването на броя на пластове се преминава от кинетичната област на работа на газофазния фотокаталитичен реактор към дифузионна област на работа, при която затруднената дифузия понижава степента на превръщането.
- По проект **„Нови каталитични материали за очистване на замърсители на въздуха“**, ФНИ, съфинансиране по COST Акция СА 17136 е изследвана каталитичната активност и стабилност на монометални Au (2 т.%) и Pd (1 т.%) и биметални Pd-Au катализатори в реакцията на пълно окисление на бензен. Изучено е влиянието на метода на получаване на смесени оксиди със състав 30 т.% CeO_2 , нанесен на $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ чрез импрегниране или механично смесване, както и ролята на добавени към цериевия диоксид итриеви йони, върху каталитичното поведение на злато-съдържащите образци. Установено е, че използването на механично смесени оксиди води до по-добри резултати. По тази причина те са използвани за носители на паладиевите и биметалните катализатори. Най-висока каталитична активност е наблюдавана при Pd катализатор, нанесен на дотиран с Y_2O_3 $\text{CeO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$, като пълно окисление на бензен е регистрирано при 180 °C. За обяснение на този резултат принос имат установените с фото-електронна спектроскопия по-високи повърхностни концентрации на Pd и Ce^{3+} , наблюдаваните с ЕПР адсорбирани супероксидни форми O_2^- в близост до Ce^{4+} и оксиредукционният преход $\text{Pd}^0 \leftrightarrow \text{PdO}$.
- По проект **„Дизайн на катализатори за опазване на околната среда с участие на хетерополи и хелатни съединения**, ЕБР, ИГТ-Прага, Чехия. Чрез хидротермален синтез при 160 °C за 24 часа са синтезирани Mo-Al и NiMo-Al катализатори с добавяне на тиогликолова киселина (TGA) с отношение $\text{TGA}/\text{Mo} = 2$ и 4 като сулфидиращо хелатно съединение. С образец NiMo-Al-TGA ($\text{TGA}/\text{Mo} = 4$) беше измерена най-висока каталитична активност (~84%) в реакцията хидродесулфуриране на тиофен при 340 °C.
- По проект **„Синтез и охарактеризиране на нанесени нановъгленни катализатори като нанокомпозити за пречистване на отпадъчни води“**, ЕБР договор с Департамент по физикохимия, Национален изследователски център, Гиза, Египет. Синтезирани са въглеродни ксерогели/въглеродни нанотръби (CX-CNT) нанохибриди и върху тях са нанесени титанови частици, изпълняващи ролята на фотокатализатор (CX-CNTs-Ti) за отстраняване на багрилото Метиленово Синьо от отпадъчни води. Установено е, че модифицираният с TiO_2 въглероден нанохибрид проявява отлични адсорбционни свойства. Титановите частици действат като активни центрове за фоторазлагането на Метиленово синьо във воден разтвор, както под действие на светлина, така и на тъмно.
- По проект **„Възобновяема интегрирана система за елиминиране на органични замърсители от води и въздух“** с ФНИ са синтезирани и охарактеризирани каталитични материали за елиминиране на органични замърсители от въздух и води. Изследвани са материали със състав $\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$, синтезирани по зол-гел метод при различни условия. Установена е връзката между количеството на използван комплексобразувател и структурните характеристики на получените материали. Получени са образци с висока повърхност, подобрени редуциционно-окислителни свойства и отлична каталитична активност в реакция на пълно окисление на етилацетат. Синтезирани са също и материали от активен

въглен модифицирани с TiO_2 по зол-гел метод. Първоначалните тестове показват обещаващи фотокаталитични свойства при почистване на води от органични багрила.

- По проект **„Морденит и ZSM-5 като катализатори в реакции за опазване на околната среда“**, Национална програма за „Млади учени и постдокторанти“ са синтезирани морденитни катализатори от калиево-натриева система. Върху изходните и киселинно третираните зеолитни носители са нанесени активни метали Pt (0.1 и 0.5 тегловни %), Cu (1, 2 и 5 тегловни %) и Pt/Cu (Pt = 0.5 и Cu = 5 тегловни %). Получените катализатори са тествани в реакции на окисление на пропан и бензен. Резултатите от каталитичните реакции показват значителна разлика между изходните и третираните образци. В реакцията на окисление на пропан по-голямата част от образците показват 100 % превръщане. В реакцията на окисление на бензен третираните катализатори се оказват по слабо активни от изходните. Причината най-вероятно е размера на молекулата на бензена и необходимостта от по-големи пори на катализатора за протичане на желаната реакция.
- По проект **„Подобрени композитни фотокатализатори за разграждане на органични замърсители във вода, активиращи се чрез UV-светлина на основата на TiO_2 и графенов оксид с нанесени благородни метали“**, Национална програма за „Млади учени и постдокторанти“ са проведени изследвания за редуциране на графенов оксид и използване на получения графен за нанасяне върху TiO_2 . Извършените експерименти са свързани с активността на фотокаталитичните образци на основата на титанов диоксид и графенов оксид в реакцията на разпад на адипинова и оксалова киселина във водна среда. Проведени са изследвания свързани с наноразмерните материали на основата на TiO_2/rGO за фотокаталитични процеси, протичащи в присъствие на O_2 и смес от O_2/O_3 . Реакциите проведени в присъствие на озон при облъчване с 254 nm светлина са с по-високи скоростни константи в сравнение с тези облъчени с 365 nm.
- По проект **„Катализатори за разлагане на озон“**, бюджетна субсидия са проведени изследвания в областта на каталитичното разлагане на озон върху смесени метал оксидни образци на основата на преходни метали. Определена е активността на синтезирани по метода на импрегниране манган оксидни катализатори, нанесени върху алуминиев оксид. Каталитичните образци са активирани чрез калциниране и е установена над 60% конверсия на озон до молекулен кислород в реакцията на разпад на озона върху повърхността на катализатора съдържащ 15% манганов оксид. В зависимост от скоростта на газовия поток са определени адсорбционните свойства на катализатора и е намерен интервалът на стойностите на коефициента на озонна деструкция, определящ кинетичната област на протичане на реакцията. В хода на реакцията е установено, че при стайна температура катализаторът работи стабилно и не се дезактивира. Катализаторът е охарактеризиран чрез използване на физичните методи БЕТ и ТЕМ. Предложен е механизъм на окислително-редукционния каталитичен цикъл на разлагане на озон на повърхността на манган оксидния катализатор.

1.2. Изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017-2030 (<https://www.mon.bg/bg/143>) - извършени дейности и постигнати резултати по конкретните приоритети.

Националните научни приоритети не могат да съществуват изолирано от Европейските и световни тенденции. Това налага в научните изследвания да се насочват повече и по-ефективни инвестиции в области, пряко свързани с енергийни източници и енергоспестяващи технологии; контрол и преработка на вредните и опасни битови и промишлени отпадъци; нови суровини и материали, храните, здравето и др.

Приетата през 2018 година Стратегия за развитие на ИК до 2030 г. е в съответствие с Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017-2030, Стратегията за развитие на БАН 2018-2030, както и с ролята на ИК в съвременното общество. Приоритетните тематични направления на ИК през 2019 г. са в съответствие с три от шестте научни приоритети за насочените фундаментални изследвания на Националната стратегия за развитие на

научните изследвания в Република България 2017-2030: Приоритет 1. Повишаване конкурентоспособността и продуктивността на икономиката в съответствие с тематичните области на ИСИС; Приоритет 2. Подобряване на качеството на живот – храни, здраве, биоразнообразие, опазване на околната среда, градска среда и транспорт и др.; Приоритет 3. Енергия и енергийна ефективност; ефективно оползотворяване на природни ресурси.

Приоритет 1. Повишаване конкурентоспособността и продуктивността на икономиката в съответствие с тематичните области на ИСИС.

През 2019 г. ИК участва в два консорциума, одобрени за финансиране по Приоритетна ос 1 на Оперативната програма „Наука и образование за интелигентен растеж. Това са „Национален център по мехатроника и чисти технологии“ и Център за компетентност: „Център за компетентност ХИТМОБИЛ“. От получените средства по проекта BG05M2OP001-1.001-0008-C01 „Национален център по мехатроника и чисти технологии“ след провеждане на процедура по обществена поръчка бяха закупени Бързосканиращ спектrophотометър OCEAN OPTICS и клетка за *in situ* измервания с Мьосбауерова спектроскопия.

ИК е партньор в разпределената инфраструктура ИНФРАМАТ, в резултат на което през 2019 година в Инстута беше създадена нова, отговаряща на европейските стандарти лаборатория за синтез на катализатори. Закупени бяха и елементи за подобряване на наличната в Института апаратура.

ИК е съизпълнител на проект „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“ по програмата Е+, D01-214/2018, , по която през 2019 г. бяха разработени катализатори за следните последователни процеси:

получаването на чист водород:

- Каталитичен реформинг на биогаз. Катализаторите са на основата на Ni нанесен на хидроталкитни структури. Изследвано е и влиянието на добавка от благороден метал.
- Конверсия на CO с водна пара.
- Селективно окисление на остатъчния CO.

Улавяне на CO₂.

- Изследвана е адсорбцията на CO₂ върху зеолит FANaX (FA – fly ash) синтезиран от въглищна пепел и референтен зеолит NaX, синтезиран от чисти химикали, пример за евтин сорбент на CO₂ с висока ефективност, синтезиран от отпаден продукт.
- Беше извършена оптимизация на лабораторната технология за получаване на Ni-базирани керамични аноди с приложение в протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки при използването на анодна керамична матрица протон-проводящия електролит итрий-дотиран бариев церат (BCY15).

Приоритет 2. Подобряване на качеството на живот – храни, здраве, биоразнообразие, опазване на околната среда, градска среда и транспорт и др.

В ИК се работи върху дизайна на катализатори за получаване на висококачествени хидрогенирани масла и маслени продукти, използвани като суровини за хранително-вкусовата промишленост, чрез процеса на частично хидрогениране на растителни масла. Създадените наноразмерни никелови катализатори, нанесени върху природни или синтетични силикатни носители, модифицирани с добавки от сребро и магнезий, осигуряват възможност за контролиране съдържанието на наситените и *транс*-мастните киселини в хидрогенираните продукти.

В Института се провеждат изследвания за идентифициране на храни, стерилизирани чрез облъчване с високо-енергетично лъчение. Три от основните стандарти за идентифициране на облъчени храни на Европейската комисия по стандартизация (EN) използват метода на ЕПР спектроскопията. Създадени са технологии за дозиметричен контрол на високоенергетично лъчение, идентифициране на облъчени хранителни продукти и определяне на антиоксидантни свойства на натурални продукти с използване на метода на ЕПР.

Изследователите от ИК участват в дизайна и синтеза на нови наноструктурирани полупроводникови фотокатализатори, които използват слънчева енергия или изкуствено осветление (УВ светлина, комбинирана УВ светлина и озон, видима светлина) за почистване на води и въздух, имащи отношение към опазване на околната среда и подобряване на качеството на живот. Сред

разработените наноразмерни оксидни и композитни фотокатализатори особено ефективни са композитите, включващи полупроводникови материали и редуциран графенов оксид (RGO).

Научни колективи от Института работят върху дизайн на катализатори за опазване на околната среда с участие на хетерополи и хелатни съединения, изследване на наноразмерни оксиди с контролиран размер и морфология модифицирани с благородни метали (Au, Pt, Pd, Ru) за процеси на очистване на газове (пълно окисление на летливи органични вещества и PROX процес), както и функционални композитни наноматериали, получени от природни източници, за опазване на околната среда.

Учени от ИК са участници в три COST Акции, свързани с проблемите на опазване на околната среда: „Мрежа за качество на въздуха в затворени помещения“ (Indoor air pollution network), „Решения за критични суровини, използвани в материали, работещи при екстремни условия“ и „Механохимия за устойчива индустрия“

С екологична насоченост са проектите, финансирани от ФНИ: „Възобновяема интегрирана система за елиминиране на органични замърсители от води и въздух“ и „Комплексно изследване на фини прахови частици в атмосферата чрез лидарно локализиране на време-пространственото им разпределение, характеризирание по състав, структура, морфология и микробно съдържание“, по които работят два колектива учени от института.

Синтезират се функционални фоточувствителни и ДНК багрила по нови екологически „зелени“ методи за синтез за приложение в супрамолекулярната химия, за фотодинамична терапия, нелинейната оптика и катализа. Разработваните методи са енергийно ефективни, а получените продукти се отличават с висока чистота и висок добив. Разработват се процеси на деструкция и стабилизация на различни органични съединения.

Приоритет 3. Енергия и енергийна ефективност; ефективно оползотворяване на природни ресурси.

Научноизследователската работа в ИК по отношение получаването на чиста енергия и нови енергийни източници е съобразена с търсенето на високоефективни екологично чисти технологии и алтернативни горива, чиято употреба не е съпроводена с отделяне на вредни емисии. Дейностите са в хармония с националните и европейски приоритети в тази област и имат обща основа с изследванията на нови наноструктурирани материали с мултифункционални повърхности и наноматериали с контролиран дизайн и подобрени каталитични свойства.

Колектив от учени работи по проекти, свързани с получаването на водород чрез процесите на реформинг на метан (паров, сух и автотермичен) и от възобновяеми енергийни източници: реформинг на биогаз и на биоетанол, получени от остатъчна биомаса. Създадени са високо ефективни катализатори, гарантиращи успешното превръщане на биогаз и биоетанол до водород и ценни химикали, което увеличава възможността за използването на възобновяеми източници, способни да генерират устойчиво енергия и химични продукти.

Синтезирани са катализатори за получаване на водород чрез реформинг на метан с въглероден диоксид. Този процес има важно значение за опазването на околната среда, защото води до намаляване на концентрациите на натрупаните в атмосферата CO₂ и метан, известни като „газове с парников ефект“.

В ИК са разработени наноразмерни слоеви двойни хидроксиди на основата на преходни метали като катализатори за фино очистване от CO₂ чрез нискотемпературно метаниране. Основа на изследванията са постигане на висока каталитична активност чрез подбор на метода на получаване и модифициране на състава и структурата. Разработен е интегриран процес за производство на чист водород, съчетано с оползотворяване на парниковия газ CO₂. Основна цел е дизайна на нови активни, стабилни и икономически конкурентни наноразмерни каталитични материали, на базата на изучаване на зависимостта между физикохимичните и каталитични им свойства в изследваните процеси.

Съществена част от провежданите в ИК изследвания имат и научно-приложен характер. Целта е да се постигне оптимален баланс между фундаментални и приложни изследвания и иновации (фундаменталните изследвания предхождат и са в полза на приложните изследвания и иновациите).

Стратегическата цел на Националната стратегия за развитие на науката 2017-2030 е да подпомогне развитието на науката в България за превръщането ѝ във фактор за развитие на икономика, базирана на знанието и иновационните дейности. Интердисциплинарния характер на научните изследвания в ИК изцяло се вписват в тази главна стратегическа цел. В тази връзка утвърдените приоритетни тематични направления на Института са в съответствие в тематичните области, дефинирани в Иновационната стратегия за интелигентна специализация (ИСИС) и приоритетните направления за развитие на приложните научни изследвания в България 2017-2030:

- Съвременни енергийни източници и енергийно ефективни технологии;
- Опазване на околната среда; Екологичен мониторинг; Оползотворяване на суровини и биоресурси; Пречистващи и безотпадни технологии;
- Материалознание, нано и квантови технологии.

Привличането и задържането на висококвалифицирани и мотивирани изследователи за поддържане на високо научно ниво на изследванията в ИК се постига с диференцирано заплащане, обвързано с постигнатите научни резултати в предходния период (след периодична атестация). Въведената система за диференцирано заплащане на учените включва два компонента: (1) основната работна заплата с фиксиран размер за отделните научни длъжности и (2) допълнително материално стимулиране (ДМС), обвързано с конкретни научни резултати.

Политика на ръководството на ИК е привличане на млади хора за научна работа, като стремежът е да им се осигурят привлекателни условия за работа, висока квалификация и ускорено кариерно развитие. През 2019 година в Инстута бяха организирани специализирани лекционни и практически курсове за млади учени и новопостъпили служители.

Учените от ИК осъществяват ефективно сътрудничество с водещи научни центрове в различни страни чрез проекти по рамковите програми на ЕС, Програма COST (3 проекта) и Erasmus+. В ИК се изпълняват съвместни проекти с: Института по физикохимия на Румънската академия, гр. Букурещ, Институт по макромолекулна химия, гр. Яш, Румъния; Института по катализ и химия на повърхността на Полската академия (Краков); Института по химия, технология и металургия на Сръбската академия (Белград); Института по нефтохимичен синтез на Руската академия (Москва); Институт по основи на химичните процеси, Чешка Академия на науките; Института по геотехника на Словашката академия на науките (Кошице); Университет Гент, Белгия; Московският държавен университет „М. В. Ломоносов“; Университет на Лотарингия, Нанси, Франция; Институт по катализ и нефтохимия в Мадрид (Испания); ИГТ-Прага, Чехия; Университет на Торино (Италия); Институт по наноматериали, Национален съвет за изследвания, Палермо, Италия; Технологичен университет в Делхи (Индия); Департамент по физикохимия, Национален изследователски център, Гиза, Египет. Пряк резултат от работата са съвместни публикации с учени от тези организации в реномирани списания. Пълноценно се използват възможностите на европейските програми в областта на НИРД. Разширява се участието на българските учени и научни колективи в двустранно и международно научно сътрудничество. В ИК се работи по **11** проекта в рамките на междуакадемично сътрудничество и по **6** проекта в рамките на двустранните спогодби, финансирани от ФНИ.

В изпълнение на **Специфична цел 10** (*Значително интензифициране на връзките на науката с образованието, бизнеса, държавните органи и обществото като цяло*), от Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017 – 2030, през 2019 г., учени от ИК се включиха в съвместната програма между МОН и БАН „Образование с наука“ с работа по проект „Химичният експеримент - метод, средство и условие за формирането на природонаучната грамотност“. Дейността на проекта е популяризирана на събития, организирани от МОН и БАН, както и в националните медии.

Под ръководството на учени от ИК студенти от университети изготвят дипломни работи за образователните степени „бакалавър“ и „магистър“. Поддържа се актуална интернет страница.

Учени от Института участват като експерти в МОН, постоянни комисии към ФНИ, консултативни експертни съвети, членове са на редакционни колегии и рецензенти в реномирани международни издания.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности.

Тематиките, разработвани от учените в ИК, имат конкретни приложение в областите за подобряване качеството на живот. Научноизследователската работа в ИК по отношение получаването на чиста енергия и нови енергийни източници е съобразена с търсенето на високоефективни екологично чисти технологии и алтернативни горива, чиято употреба не е съпроводена с отделяне на вредни емисии. Дейностите са в хармония с националните и европейски приоритети в тази област и имат обща основа с изследванията на нови наноструктурирани материали с мултифункционални повърхности и наноматериали с контролиран дизайн и подобрени каталитични свойства.

Основната научноизследователска дейност е адаптирана по такъв начин, че да отговоря на актуалните обществени предизвикателства (технологични, екологични, социални) в съответствие с целите и приоритетите на Рамковите програми на ЕК за научни изследвания и иновации, Стратегията за интелигентен, устойчив и приобщаващ растеж - Европа 2020, Иновационната стратегия за интелигентна специализация на Република България, Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017-2030 г.

Фундаменталните изследвания, провеждани в ИК са пряко свързани с ефективно използване на наличните суровини и създаване на нова суровинна база; създаване на ефективни системи за опазване на околната среда; усвояване на нови източници на енергия; създаване на нови вещества и материали с предварително зададени свойства; разработване на нови и усъвършенстване на съществуващите технологии и процеси.

Научната дейност на ИК се развива съгласно приоритети на световната каталитична наука и резултатите от фундаменталните изследвания на изследователите намират международен отзвук и признание.

В ИК се работи усилено в насоки, обвързани с взаимодействие с обществото и разработка на обществено значими научно-приложни изследвания и анализи:

- Получаване на водород от природни и възобновяеми енергийни суровини;
- Получаване на чист водород за горивни клетки;
- Каталитично почистване на отпадъчни газове и води;
- Наноструктурирани материали с мултифункционални свойства.
- Наноматериали с контролиран дизайн и подобрени каталитични свойства.
- Разработване и приложение на фотокаталитични реактори за почистване на въздух и води;
- Физикохимични, спектрални и термични анализи;
- Дезинфекция и стерилизация на медицински изделия;
- Висококачествени хидрогенирани масла, намиращи приложение в хранително-вкусовата промишленост;
- Деструкция и стабилизация на органични и високомолекулни съединения;
- Нови екологически приемливи („зелени“) методи за синтез на нови функционални багрила
- Синтез на флуоресцентни багрила за свързване с ДНК.
- Супрамолекулярни устройства на основата на фотохромни съединения за акумулиране на слънчева енергия;
- Дозиметри на база твърдо тяло за идентифициране на облъчени храни;
- Научни консултации, експертизи и програми в страната и чужбина по въпросите на методологията и изпълнението на проекти и дейности в областта на предмета на дейност на ИК.

1.4. Взаимоотношения с институции

Институтът по катализ има тесни връзки с редица университети и научни институции в България и чужбина, както и индустриални предприятия. ИК има рамкови договори с ХТМУ - София, ФХФ на СУ „Св. Климент Охридски“, Университет „Проф. д-р Ас. Златаров“ - Бургас, ПУ „Паисий Хилендарски“, ТУ - Стара Загора, Русенски университет „А. Кънчев“ - клон Разград.

В чужбина ИК има сключени рамкови договори с академични институти и университети: Московски държавен университет „В. М. Ломоносов“; Институт по катализ „Акад. Г. К. Боресков“ при Сибирското отделение на РАН – Новосибирск; Институт по неорганична химия към ЛАН – Латвия; Федерален университет на Сан Карлос, Институт по катализ и нефтохимия, Мадрид, Испания; Белградски университет; Университет Гент, Белгия; Институт по химия, технология и металургия, Сърбия, Институт по физикохимия на РА, Букурещ; Института по геотехника на САН, Кошице, Словакия; Институт по основи на химичните процеси, Чешка Академия на науките; Факултета по неорганична химия към университета в Севиля, Испания; Университет du Littoral-Côte d'Opale (UCEIV), Дюнкерк, Франция.

В ИК се работи и по проекти с фирма „Техкерамик-М“ ООД, Мездра и „ГенСел“, Петах Тиква, Израел.

1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата

За отчетния период няма пряко регламентирани общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата, но като общонационално значими могат да бъдат посочени следните дейности:

ИК е седалище на Клуб на българските катализи (КБК), обединяващ 126 специалисти, работещи в областта на катализа от научните институти, университети и индустрията в страната. КБК е колективен член на Съюза на химиците в България, на Европейската федерация на каталитичните дружества (European Federation of Catalysis Societies, EFCATS) и на Международната асоциация на каталитичните дружества (International Association of Catalysis Societies, IACS). Елемент от структурата на ИК е Националният център по ЕПР спектроскопия. ИК е седалище на Българското ЕПР дружество от 1991 г.

ИК- БАН е единственото научно-изследователско звено в страната с експертен потенциал и подготвени кадри за решаване на научно-изследователски и научно-приложни задачи в областта на хетерогенния, хомогенния и фотокатализ, химичната кинетика, химичната стабилизация и специфичните изследователски методи, приложими в катализа. Учени и специалисти участват активно в обучението и подготовката на кадри в областта на катализа.

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2019 г.

Научната дейност на ИК е изградена на проектен принцип. През 2018 г. беше приет научно-изследователски план за периода 2018-2020 г., който е в съответствие с Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2013-2020 г., рамковата програма на Европейския съюз за научни изследвания и иновации Хоризонт 2020, Стратегия „Европа 2020“, Стратегията за развитие на БАН 2018-2030 и Национална стратегия за интелигентна специализация. В ИК се работи по 3 основни тематични направления, всяко от които включва конкретните задачи. Изпълнението на всяка задача е свързано с работата по различни типове проекти. ИК участва в 3 COST акции: COST Акция ОС-2015-1 „Решения за критични суровини, използвани в материали, работещи при екстремни условия“ с координатор проф. д-р Зара Черкезова-Желева, СА 17136 „Мрежа за качество на въздуха в затворени помещения“ с координатор проф. д-р Татяна Табакова и СА18112 „Механохимия за устойчива индустрия“ с координатор проф. д-р Зара Черкезова-Желева, 18 проекта, финансирани от ФНИ, 11 проекта по програмата за ЕБР на БАН, 2 проекта от НП "Млади учени и постдокторанти" и 2 съвместни проекти с фирми, 1 с фирмата „GenCell Ltd“, Израел и 1 с „Техкерамик“ ООД Мездра.

През отчетния период в Института са изпълнявани 6 проекта от конкурс „Финансиране на научни изследвания в приоритетни области“ с базова организация Институт по катализ, а в 3 проекта по конкурса Институтът е съизпълнител. В ИК се работи по 6 проекта за Двустранно сътрудничество, финансирани от ФНИ, съответно с Франция -1, Русия-2, Словакия-1 и Индия-2.

Резултатите от научноизследователската дейност на ИК през 2019 година за публикувани в 38 научни труда, в това число 33 публикации в реферирани и индексирани от WoS и SCOPUS, като 4 публикации са в списания, които оглавяват ранглистата в съответната научна област, 6 научни

публикации в издания, които попадат в категория Q1, но не оглавяват ранглистата, **8** в категория Q2, **8** в категория Q3 и **5** в категория Q4, **4** реферирани научни публикации в издания, неиндексирани в WoS и Scopus и **1** научни публикации в рецензирани тематични сборници, издадени от международни академични издателства и **1** рецензирани тематични сборници, издадени от национални академични издателства. Приети за печат в списания, индексирани от WoS и SCOPUS са **8** публикации,

През 2019 година **369** научни трудове на учени от Института са цитирани **1411** пъти в реномирани научни издания и дисертации. Както и в предходни години, продължава цитирането на научни публикации, публикувани през осемдесетте и деветдесетте години, потвърждение за високата научна стойност на получените резултати.

Доказателство за качеството на научната продукция е представянето на учените на ИК на научните форуми в страната и чужбина. През 2019 година са представени: **1** пленарен доклад на международен научен форум (Z. Cherkezova-Zheleva - Serbian Ceramic Conference: Advanced Ceramics and Applications VIII: New Frontiers in Multifunctional Material Science and Processing), **8** доклада на международен научен форум и **1** на национален научен форум, **9** постерни доклада на международни научни форуми и **13** постерни доклада на национални научни форуми.

На 27-ми юни 2019 г. в Института по катализ бе проведена поредната 16-та Национална конференция по катализ на Сдружение „Клуб на българските каталиници“, посветена на 150-годишнината от основаването на БАН и 80-годишния юбилей на чл.кор.проф. Лъчезар Петров. Участваха **62** членове на С”КБК”. Представени бяха **3** устни доклада и **41** постерни съобщения. Материалите от този научен форум ще бъдат публикувани в специален брой на списание „Bulgarian Chemical Communications“ с гост-редактори Ч. Бонев и Г. Кадинов.

Нашите изследователи са гостували като лектори и специалисти в чужди университети, изследователски центрове и фирми във връзка с изпълнението на съвместни проекти.

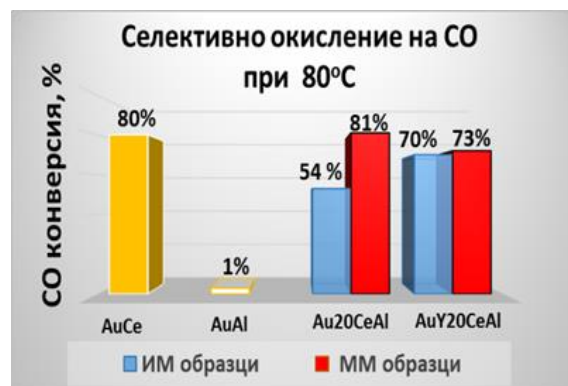
Учени от Института участват в ръководните органи и като членове на научни организации. Проф. д-р Юрий Кълвачев е заместник председател на Хумболтовия съюз в България, председател е на Временната научно-експертна комисия „Научни форуми и COST“ и е член на постоянен подкомитет „Научни изследвания и технологично развитие“ към Комитета за наблюдение на ОП НОИР, а проф. д-р Зара Черкезова-Желева е национално контактно лице в Европейски научноизследователски съвет. През 2019 г. проф. Желева е взела участие в Годишната среща на Европейските информационни мрежи в България 25-26 юни 2019, участвала е като официален консултант на спечелен синергиен ЕНИ проект, взела е участие във форуми на НКМ, по направление Европейски съвет за научни изследвания (European Research Council – ERC) в Брюксел, Белгия, както и в "Action for Standards" COST Connect workshop on research for standardisation.

2.1. Най-значимо научно постижение на ИК - БАН за 2019 г.

ЗЛАТО-СЪДЪРЖАЩИ КАТАЛИЗАТОРИ, НАНЕСЕНИ НА Y₂O₃-МОДИФИЦИРАНИ CeO₂/Al₂O₃ НОСИТЕЛИ ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА ЧИСТ ВОДОРОД

Ръководител: проф. д-р Люба Илиева

Разработени са модифицирани с Y₂O₃ смесени CeO₂/Al₂O₃ оксиди, които са използвани за носители на злато-съдържащи катализатори. Чрез различни синтезни техники е формиран наноразмерен слой от CeO₂ на повърхността на γ-Al₂O₃, обуславящ икономическата ефективност на създадените каталитични материали поради значително намаленото количество скъп редкоземен цериев диоксид в сравнение с широко изследваните катализатори Au/CeO₂. Детайлно е изследвано влиянието на количеството на цериевия диоксид (10, 20 и 30 т.%) и метода на синтез на модифицираните носители. Разработените активни и стабилни многокомпонентни системи са изследвани в реакцията на селективно окисление на СО в богата на водород среда и показват перспективни каталитични свойства за получаването на екологично чистото гориво водород.



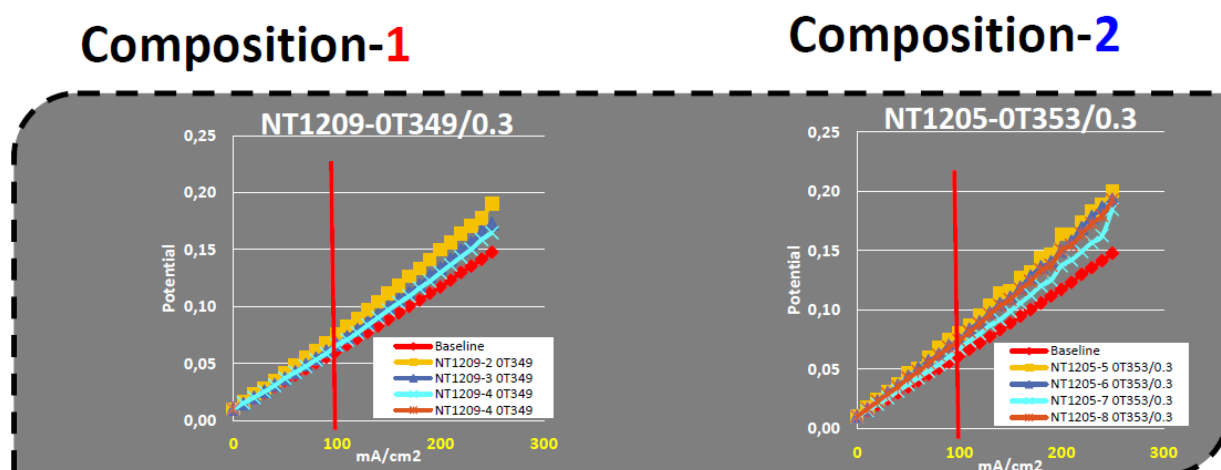
Влияние на състава и метода на получаване на модифицирани носители върху активността на злато-съдържащи катализатори в реакцията на селективно окисление на CO в богата на водород среда

Разработката е отразена в:

1. L. Ilieva, P. Petrova, G. Pantaleo, R. Zanella, J.W. Sobczak, W. Lisowski, Z. Kaszkur, G. Munteanu, I. Yordanova, L.F. Liotta, A.M. Venezia, T. Tabakova, "Alumina supported Au/Y-doped ceria catalysts for pure hydrogen production via PROX", Int. J. Hydrogen Energy, 44 (1) (2019) 233-245.
2. L. Ilieva, P. Petrova, G. Pantaleo, R. Zanella, Z. Kaszkur, L. F. Liotta, A. M. Venezia, T. Tabakova, "Effect of preparation method on the performance for PROX of gold catalysts on alumina supported Y-doped ceria", Int. J. Theor. Appl. Nanotechn., 7 (2019) 16-23, Avestia Publishing.

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение на ИК за 2019 г.

Създаден е аноден катализатор за горивни клетки, състоящ се само от неблагородни метали с основен компонент никел и добавки от преходни метали, чиято електрохимична активност е идентична с тази на класическия платинов аноден катализатор. Съставът на катализатора, неговият синтез, като и получаването на анода са в процес на патентоване (Заявка за патент № 6250-V50510, Nickel-based catalyst for fuel cell anode, N. Borchtchoukova, Y. Wijsboom, G. Finkelshtain, D. Nikolova, M. Gabrovska).



Електрохимична активност на два състава никелови-базирани катализатора при тест полу-клетка сравнена с GenCell стандарт 7, 6М KOH, 70°C

Ръководител на разработката е доц. д-р Димитринка Николова.

Резултатите от разработката са отразени в:

Заявка за патент № 6250-V50510, Nickel-based catalyst for fuel cell anode, N. Borchtchoukova, Y. Wijsboom, G. Finkelshtain, D. Nikolova, M. Gabrovska.

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ЗВЕНТО

3.1. В рамките на договори и спогодби на ниво Академия

Сътрудничеството в рамките на спогодби на ниво Академия обхваща 11 проекта: Институт по физикохимия на ПАН, Варшава-1; ИФ РА, Букурещ Румъния-4; Институт по макромолекулярна химия, гр. Яш, Румъния -1; ИХТМ БУ, Сърбия, Белград-3; ИГТ-Прага, Чехия-1; Институт по геотехника на САН, Кошице, Словакия-1. Темите на проектите са в областта на приоритетните научни направления, като екология, зелена химия, енергетика, нови материали. Получените резултати от тези сътрудничества се публикуват в съвместни работи в реномирани международни списания.

3.2. В рамките на договори и спогодби на институтско ниво.

Институтът по катализ има споразумения за сътрудничество в рамките на 5 проекта с:

- Факултета по неорганична химия към университета в Севиля, Испания;
- Университета du Littoral-Côte d'Opale(UCEIV), Dunkerque, Франция;
- Институт по катализ и нефтохимия, Мадрид, Испания;
- Кувейтски институт за научни изследвания.

Научната продукция, която е резултат от международното сътрудничество обхваща публикации предимно в престижни международни списания (Applied Catalysis A, Applied Catalysis B, Catalysis Today, Catalysis Letters, Catalysis Communication, International Journal of Hydrogen Energy, Applied Surface Science, Frontiers, Photochemistry and photobiology, A:Chemistry, и др. Редица чуждестранни учени са гостували през изтеклата година на ИК-БАН.

В ИК успешно се работи по три проекта от програма COST (CA15102 и CA 17136 01/22....)

Учените от ИК се стремят да разширят научното сътрудничество със страните от ЕС по линия на рамковите програми.

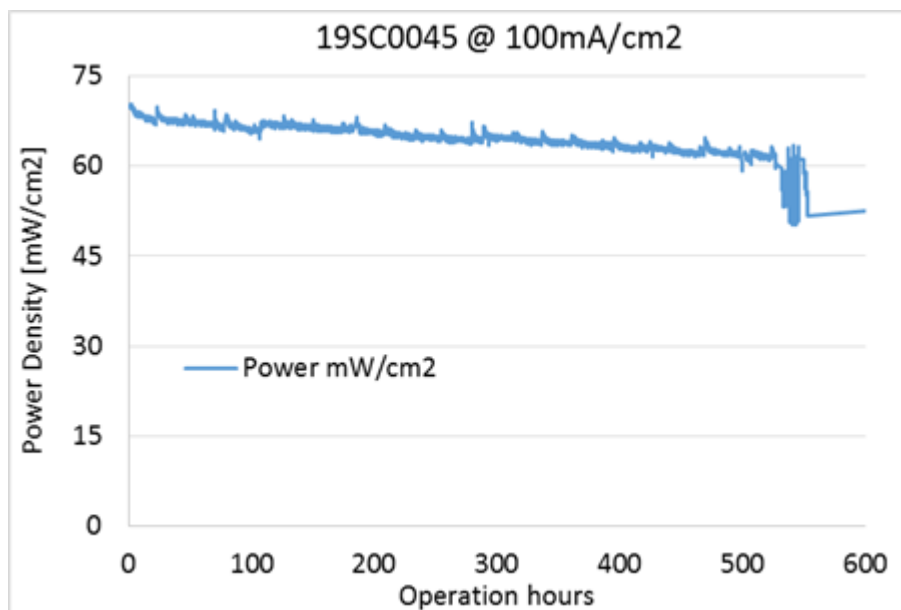
В ИК се работи по договори в рамките и на Двустранно научно-техническо сътрудничество с Франция -1, Русия -2, Словакия -1 и Индия -2.

Значим международно финансиран проект

Договор с GenCell Ltd, Петах Тиква, Израел:

Аноди на алкални електролитни клетки на база неблагородни метали (2012-текущ)

По съвместен проект с фирмата GenCell, Петах Тиква, Израел е разработен аноден катализатор състоящ се само от неблагородни метали с основен компонент никел и добавки от преходни метали, чийто състав и получаване са в процес на патентоване. (Заявка за патент № 6250-V50510, Nickel-based catalyst for fuel cell anode, N. Borchtchoukova, Y. Wijsboom, G. Finkelshtain, D. Nikolova, M. Gabrovska). Работи се върху оптимизация на състава и увеличаване на продължителността на работа на анодния катализатор. Едновременно с това се разработва преминаването от лабораторен към промишлен синтез.



Продължителност на работа на анодния катализатор в единична горивна клетка

Ръководители на разработката от Институт по катализ – БАН: проф. дн Славчо Раковски и доц. д-р Маргарита Габровска

Участници: доц. д-р Димитринка Николова, спец-химик Любима Билярска.

GenCell LTD-Израел: Ръководител: Gennadi Finkelshtain, CTO & VP R&D, участници: Nino Borchtchoukova, R&D Manager, Yair Wijsboom, PhD, Senior Electrochemist, Vyacheslav Feldman, Production Supervisor

4. УЧАСТИЕ НА ИК-БАН В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ

Научно-изследователския състав на ИК активно участва в подготовката на студенти, дипломанти и докторанти с изнасяне на лекции, водене на семинарни занятия, курсове и обучение по програмата на МОН за студентски практики.

Учени от ИК участват в научни журита при защита на дисертации за научна степен доктор и доктор на науките и в конкурси за академични звания.

За пълноценната работа на учените от съществено значение са съществуващите тесни връзки на ИК с Университетите в България и с научните институции в чужбина. ИК има рамкови договори с ХТМУ - София, Университет „Проф. д-р Ас. Златаров“ - Бургас, Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“. ИК е в договорни отношения за сътрудничество и обучение на специалисти с Университет „Проф. д-р Ас. Златаров“ в Бургас.

През 2019 година проф. дхн Иван Митов проведе втора част от образователния курс „Въведение в адсорбцията и хетерогенния катализ“ на осем новоназначени на работа в Института студенти. Доц. д-р Валентин Алексиев проведе курс за обучение на млади учени, докторанти и постдокторанти: „Въведение в компютърната химия I - Моделиране на молекулни системи“ (6 дни – 2 часа лекции + 2 часа упражнения) с 8 участника, двама от Университет „Проф. д-р Ас. Златаров“ - Бургас, един от ХТМУ – София, един от Институт по механика – БАН, двама от Институт по катализ – БАН и двама от Институт по обща и неорганична химия - БАН. Основна цел на курса от лекции и практически упражнения (30 часа) беше да бъдат въведени и приложени нови комплексни методи за теоретична симулация на молекулни системи с цели в областите на интерес на участниците.

От 2014 г., ИК има акредитация за обучение на докторанти по специалностите „Химична кинетика и катализ“ и „Химия на твърдото тяло“. Акредитацията е за срок от 6 години.

В ИК студенти изработват дипломни работи за образователните степени „бакалавър“ и „магистър“.

Институтът по Катализ е част от съвместната програма на БАН и МОН „Образование с наука“, в която участва с проект „Химичният експеримент – метод, средство и условие за формиране на природонаучната грамотност в учениците“, с ръководител на проф. д-р Силвия Тодорова. Дейността на проекта беше популяризирана на организирани съвместни от МОН и БАН събития: Откриване на програмата в Етнографски музей на БАН, работна среща с българската асоциация на частните училища и Юбилеен научен панаир „150 години Българска академия на науките“, както и в националните медии. В съответствие с предвидените по програмата дейности, учениците от три столични училища – НПМГ, 1 АЕГ и 68 СОУ посетиха лабораториите на Института и се запознаха с научните теми, по които работят учените. Под ръководството на учени от Института учениците проведоха самостоятелни изследвания по конкретни научни теми и задачи в новоизградената лаборатория за синтез на катализатори. Научно-експерименталната дейност беше съобразена с учебната програма по Химия и опазване на околната среда.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНОТО И АНАЛИЗ НА НЕЙНАТА ЕФЕКТИВНОСТ

В съответствие с класификацията на Центъра за иновации към БАН, по-голямата част от разработките на ИК през 2019 г. са на различен етап от фаза IR – изследователска фаза.

В ИК съществува значителен брой иновационни научни продукти, готови за реализация при проявен интерес от страна на промишлеността. Създадени са технологии за синтез на високоефективни наноразмерни фотокатализатори на основата на титанов диоксид и технологии за дезинфекция и почистване на въздух и води от органични замърсители с активиране от слънчева светлина, наноразмерни катализатори за хидрогениране на растителни масла, нискотемпературен наноразмерен никелов катализатор за дълбоко почистване на богати на водород газови смеси от CO_2 чрез метаниране, наноразмерни нанесени златни катализатори и технологии за тяхното приложение в процеси за почистване на отпадъчни газове и получаване на чист водород; наноразмерни катализатори и технология за получаване на синтез газ и водород от възобновяеми източници (биогаз); катализатор и технология за получаване на етилен и пропилен от етан и пропан; нови катализатори на основата на твърди киселини за почистване на дизелови фракции от съединения, съдържащи хетероатоми, за получаване на горива съгласно най-новите изисквания на евростандартите.

Създадени са устройства за фотохимично почистване на въздух в затворени помещения като офиси, салони на самолети, болнични стаи, операционни помещения, стерилизационни и др. и технологии за почистване на въздуха на открито, дезинфекция на съоръжения за масово използване на обществени места. На основата на механично и комбинирано механо-термично въздействие е създаден метод и технология за дълбочинна преработка на пиритни концентрати и за извличане на цветни метали, железни соли и благородни метали от тях. Създаден е метод за механохимичен синтез на наноразмерни ферити (Co-Fe-O , Ni-Fe-O , Zn-Fe-O , Cu-Fe-O , смесени ферити). Синтезираните материали притежават стабилна с времето магнитна структура. Създадени са дозиметри на база твърдо тяло за идентифициране на облъчени храни с метода на ЕПР. Синтезирани са фото- и термочувствителни органични съединения за приложение като оптични превключватели, динамични биосензори, в системи за акумулиране на слънчева енергия. Синтезирани са флуоресцентни маркери за ДНК за фотодинамична терапия.

След сключен рамков договор за съвместна дейност и научно обслужване е оказвана помощ на индустриалната фирма „ТЕХКЕРАМИК“ ООД - Мездра за входящ и изходящ контрол на суровини, междинни и крайни продукти. Чрез спектрални анализи е извършвана контролна дейност за спазване на технологичен режим и регламент. Извършваната дейност е представяна на фирмата като поредица от експертизи.

В ИК са създадени готови за реализация научни продукти:

1. „Озоногенериращи системи“ за получаване на озон. Системата включва 5 независими модула: Газоподготовка, Озоногенериране, Реакторен, Аналитичен и Доразграждащ в три разновидности с производителност съответно до 10, 100 и 1000 г/ч озон. Тези озоногенериращи системи са приложими в химическата промишленост, екологията,

водоподготовката и почистването на отточни води, отпадъчни газове и замърсени почви. Те могат да бъдат приложени и в медицината за дезинфекция и стерилизация на болнични стаи, операционни, затворени помещения, в селското стопанство, при съхранение на плодове и зеленчуци и др.

2. Фотокаталитично устройство за почистване на въздуха в затворени помещения.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНОТО

През 2019 г. ИК – БАН има приходи в размер на 6549 лв. от отдаване под наем на три помещения за складови нужди в бл.12 и бл.11, ул. „Акад.Георги Бончев“. Цените, по които е формиран наема, са съгласно приетите от ръководството на БАН препоръчителни месечни цени за отдаване под наем на активи.

ИК извършва дейност по сервизни услуги по тотален органичен въглерод, Температурно програмирана десорбция (ТПД-1), Температурно програмирана редукция (ТПР-2), Температурно програмирано окисление, специфична повърхност (БЕТ), Порьозност, Рентгенова фотоелектронна спектроскопия, Рентгенова дифракция, Мьосбауерова спектроскопия, Озонно титруване, Инфрочервена спектроскопия, Диференциална сканираща калориметрия, Газова хроматография, Атомно абсорбционна спектроскопия, Ултравioletови спектри по утвърден ценоразпис публикуван на интернет страницата на Института. За 2019 г. от сервизни услуги ИК има приходи в размер на 9 878 лв.

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ЗВЕНОТО ЗА 2019 Г.

№.	Наименование на приходите/разходите	Изпълнение
I.	ПРИХОДИ	105 692
1	Приходи от продажба на услуги, стоки и продукция	99 143
2	Приходи от отдаване под наем на недвижимо имущество	6 549
II.	РАЗХОДИ	1 565 781
	Заплати и възнаграждение на персонала нает по трудови	
1	правоотношения	860 594
2	Други възнаграждения и плащания за персонала	184 923
	В т.ч. – за нещатен персонал по трудови правоотношение	20 867
	- за персонала в извънтрудови правоотношения	12 635
	- обезщетения с характер на възнаграждения	20 379
	- други плащания и възнаграждения	131 042
3	Осигурителни вноски от работодателя за ДОО	127 258
4	Здравноосигурителни вноски от работодателя	48 872
5	Вноски за допълнително задължително осигуряване	21 477
6	Издръжка	250 171
	в т.ч. – храна, постелен инвентар и облекло	986
	- учебни и НИР и книги за библиотеки	180
	- материали	55 038
	- вода, горива и енергия	40 185
	- разходи за външни услуги	47 303
	- текущ ремонт	34 077
	- командировки в страната	2 896
	- командировки в чужбина	60 990
	- разходи за застраховки	498

- други финансови услуги	704
- други разходи	7 314
7 Платени данъци, такси и административни санкции	5 170
8 Основен ремонт на дълготрайни материални активи	18 420
9 Придобиване на ДА	48 896
в т.ч. - компютри и хардуер	7 078
- друго оборудване, машини и съоразения	41 818
III. БЮДЖЕТНА СУБСИДИЯ	1 119 712
IV. ТРАНСФЕРИ	346 461
V. ФИНАНСИРАНЕ	
в т.ч. - остатък по сметки от предходния период	189 992
- остатък по сметки в края на периода	248 778
VI. Средногодишна брутна работна заплата на едно лице	1 241

Приходи в размер на 9 878 лева от извършени услуги и анализи.

Приходи от договори за научни разработки с организации от чужбина – 87 290 лв. по договор с GenCell Израел.

Приход във връзка с „Национална програма – Млади учени и постдокторанти“ в размер на 30 940 лв.

Приходи по 10 договора с Фонд „Научни изследвания“ – 232 300 лв.

Приходи по договор ДСД-15 „Образование с наука“ – 10 500 лв.

Приходи по договор „Консорциум за изпълнение на Национална научна програма „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита (ЕПЛЮС)“ – 33 955 лв.

Наличност в СЕБРА към 31.12.2019 г. - 308 601 лв.

8. ИЗДАТЕЛСКАТА И ИНФОРМАЦИОННА ДЕЙНОСТ.

Редица учени от института участват в редколегиите на следните специализирани списания:

доц. д-р Мария Колева

- Springer Nature Applied Sciences (SNAS)

проф. дн С. Раковски

- Bulgarian Chemical Communications;
- Catalysis in Industry, Русия;
- Apple Academic Press – Toronto, New Jersey;
- Polymers Research Journal, USA;
- International Journal of Nanochemistry and Nanobiology;
- Russian Journal of "Chemical Physics and Mesoscopy" .

проф. д-р Зара Черкезова-Желева
• Nanoscience and Nanotechnology

проф. дн Ив. Митов (асоцииран член)
• Mössbauer Effect Reference and Data Journal

проф. д-р А. Елияс
• Nanoscience and Nanotechnology

чл. кор. Л. Петров (асоцииран член)
• Bulgarian Chemical Communications;
• Journal of the University of Chemical Technology and Metallurgy;
• Химия и индустрия;
• Journal of Environmental Protection and Ecology;
• Катализ в промишлености, Калвис, Москва, Россия ;
• Catalysis in Industry, Springer, Germany.

доц. д-р Ч. Бонев
• Bulgarian Chemical Communications;
• Химия и индустрия - Зам. главен редактор

проф. дн Н. Йорданов (асоцииран член)
• Bulletin of the Chemists and Technologists of Macedonia;
• Electronic Journal of Theoretical Physics;
• Radiation Science and Technology.

9. ИНФОРМАЦИЯ ЗА НАУЧНИЯ СЪВЕТ НА ЗВЕНТО.

Научен съвет на Институт по катализ, БАН

1. Васко Идакиев, проф. д-р, председател на НС, ИК-БАН
2. Николай Велинов, доц. д-р, зам. председател на НС, ИК-БАН
3. Димитринка Николова, доц. д-р, секретар на НС, ИК-БАН
4. Силвия Тодорова, проф. д-р, директор на ИК-БАН
5. Татяна Табакова, проф. д-р, зам. директор на ИК-БАН
6. Александър Елияс, проф. д-р, ИК-БАН
7. Георги Тюлиев, проф. д-р, ИК-БАН
8. Зара Черкезова-Желева, проф. д-р, ИК-БАН
9. Юрий Кълвачев, проф. д-р, ИК-БАН
10. Даниела Панева, доц. д-р, ИК-БАН
11. Йорданка Каракирова, доц. д-р, ИК-БАН
12. Маргарита Габровска, доц. д-р, ИК-БАН
13. Мая Шопска, доц. д-р, ИК-БАН
14. Стела Минковска, доц. д-р, научен секретар на ИК-БАН
15. Христо Колев, доц. д-р, ИК-БАН
16. Никола Малиновски, проф. дн, ИОМТ-БАН
17. Тания Цончева, проф. дн, ИОХЦФ-БАН
18. Антон Найденов, проф. д-р, ИОНХ-БАН

Научният съвет на ИК-БАН е избран на ОСУ в ИК на 17.10.2019 г.

**10. КОПИЕ ОТ ПРАВИЛНИКА ЗА РАБОТА В ЗВЕНТО, ЛИНК КЪМ САЙТА,
КЪДЕТО Е КАЧЕН ПРАВИЛНИКА**

http://ic.bas.bg/uploads/file/40/pravilnik_za_deinostta_na_ik.pdf

**11. СПИСЪК НА ИЗПОЛЗВАНИТЕ В ОТЧЕТА И ПРИЛОЖЕНИЯТА КЪМ НЕГО
СЪКРАЩЕНИЯ**

1. ИК – Институт по катализ
2. ОСУ – Общо събрание на учените
3. КБК – Клуб на българските каталитици
4. ЕПР – Електронен парамагнитен резонанс
5. ЕНДОР – разновидност на ЕПР спектроскопията
6. ИФ – Иновационен фонд
7. УВ-Ултравиолетова светлина
8. УЗ-ултразвук
9. ТПР- Температурно-програмирана редукция
10. ТПС- Температурно-програмирано сулфидиране
11. ХДС-Хидродесулфориране
12. ХТМУ – Химико-технологичен и металургичен университет
13. ДМА – Дълготрайни материални активи
14. МСП– малки и средни предприятия
15. РАН – Русийска академия на науките
16. РА – Румънска академия
17. ЛАН – Латвийска академия на науките
18. ПАН - Полска академия на науките
19. ИОХЦФ-БАН- Институт по органично химия с център по фитохимия
20. ПУ- Пловдивски университет
21. ИГ-САН – Институт по геотехника, Словашка академия на науките