

**ИНСТИТУТ ПО КАТАЛИЗ
БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ**

=====

**ИЗВЛЕЧЕНИЕ ОТ
ОТЧЕТЕН ДОКЛАД
за 2020 г.**



Януари, 2021 г.

УВОД

Институтът има заети общо 57 щатни бройки. Разпределението на служителите по категории е следното: професори - 8, доценти - 9, главни асистенти – 9.5, асистенти – 2, научно-помощен персонал с висше образование – 13.5, администрация – 4, помощно-технически персонал – 9, помощно-обслужващ персонал – 2. Институтът разполага със сграден фонд включващ бл.11, бл.12 и блок 104А, ул.Акад.Георги Бончев на стойност 546 868 лв., дълготрайни материални и нематериални активи на стойност 1 064 345 лв. (в т.ч. компютри – 57 907 лв., програмни продукти – 8 992 лв., машини и съоръжения – 994 684 лв., стопански инвентар – 2 762 лв.) и материални запаси на стойност 5 393 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 научно-изследователски, научно-приложен и иновационен център в България и Европа в областта на катализа. В ИК се извършват фундаментални и приложни изследвания в областта на хетерогенния и хомогенния катализ, химичната кинетика, химичната стабилизация и специфичните изследователски методи, приложими в катализа. В Института се подготвят специализирани кадри от страната и чужбина в областта на 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 и световните приоритети на направлението. Провежданите изследвания имат интердисциплинарен характер, а получените научни резултати са конкуретни с тези на световната сцена. 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.

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.

За изследване на получените нови материали приложение намират съвременни 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 Иновационната стратегия за интелигентна специализация. Получените научни и научно-приложни резултати в ИК през 2020 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 проекта „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“ с ФНИ, е изследвана адсорбцията на СО и Н₂ върху образци (10%Co+0.5%Pd)/SiO₂ след предварителна обработка в инертна среда и редукция при температури 300 и 450 °С. Редукция при 300 °С води до активен тип катализатор с образуване на значителен дял СО₂. Адсорбционната изотерма на Н₂ съответства на енергетична еднородност на повърхността, а тази на СО показва възможност за присъствие на 3 форми. При редукция при 450 °С се получава селективен катализатор с намаление на относителния дял на СО₂ в реакционните продукти. Адсорбционните изотерми на Н₂ и СО съответстват на енергетична нееднородност на повърхността с образуване на 2 вида форми. В съответствие с тези резултати ТПД показва нискотемпературна и високотемпературна десорбция. Високотемпературната десорбция на Н₂, вероятно обуславя ограничения в образуването на повърхностни структури отговорни за СО₂. С „ин ситу“ ДООИЧС е регистрирано линейно и многоцентрично свързан СО, изменение в структурата на повърхността и 1.6-кратно нарастване на интензивността на характеристични ивици за бидентатни карбонати при хидрогениране в интервала 200-250 °С, което съответства на намалената степен на образуване на СО₂ при КВОП.
- В съответствие с предмета на рамковия договор „Техкерamik М“ АД, Мездра, получените резултати от спектралните анализи на пробите от производството на керамични материали се използват от фирмата за контрол по фазовия състав на продуктите и съответно качеството на изделията от тях.
- В резултат на проведените изследвания по договор „Аноди на алкални електролитни клетки на база неблагородни метали“ с израелската фирма GenCell Ltd, Петах Тиква, е разработена пътна карта за промишлен синтез на никелов катализатор, съдържащ добавки от преходни метали, нанесен върху активен въглен. Избран е подходящ метод на импрегниране на компонентите за промишленото получаване на катализатора. Оптимизирани са условията за редукция на каталитичната композиция.
- По проекта със Сръбската академия на науките и изкуствата, „Зелен синтез на нови каталитични материали за опазване на околната среда“, са проведени серия експерименти за механохимичен синтез на каталитични материали с перовскитова структура (LaTi_{0.4}Mg_{0.4}Fe_{0.2}O₃) и химичен състав, включващ различно съотношение на Mg и Fe. Физикохимичните им характеристики са сравнени с характеристиките на образци със същия състав, но синтезирани по конвенционален керамичен метод. Установени са зависимости на получаването на различен състав и дисперсност на образците, в зависимост от използваните условия на механохимичната и термичната обработка на материалите. Синтезираните

материали ще бъдат изследвани за почистване на отпадни води, замърсени с багрила от текстилната промишленост. Предвижда се сравнителните анализи да се направят в тест-реакциите на разлагане на метилоранж и метиленово синьо.

- По проекта с ФНИ **“Каталитични приложения на зеолити, синтезирани от въглищна пепел”** е синтезиран зеолит X от въглищна пепел, както и референтен образец зеолит X от чисти химикали. Върху референтния образец е нанесено желязо в такова количество, каквото има и синтезирания зеолит от въглищна пепел. И двата вида получени материали са модифицирани с платина и е изследвана тяхната каталитичната активност за окисляване на въглероден оксид. В присъствие на въглероден оксид, платината и железният оксид са частично редуцирани. Изследването показва, че карбонилите образувани върху платина нанесена на зеолит X от чисти химикали, са по-стабилни от същите карбонили, но образувани върху платина, отложена върху зеолит X от въглищна пепел. Най-активни са пробите с нанесена платина. Сравнението на температурата за 100 % превръщане на въглероден оксид за двата образца Pt-нанесена върху зеолит X от пепел (FANaX-0.5Pt) с Pt върху зеолит X от чисти химикали показва, че разликата е само 20 °C (160 и 180 °C) и няма разлика в този параметър между пробите FANaX-0.5Pt и NaX₄.5Fe0.5Pt. Тези резултати са обещаващи и те отварят вратата за използване на въглищната пепел за получаване на продукт с висока стойност и предлагане на по-евтина алтернатива на зеолит X като носител за катализатори.
- По проекта **“Зеолит-полиимидни хибридни материали със зададени свойства”** с Институт по макромолекулна химия, гр. Яш, Румъния, беше синтезиран зеолит L чрез използване на хидротермален синтез при различни параметри на синтеза – температура, концентрация, използване на зародиши. По този начин е получен зеолит L с различни размери на кристалитите – един в диапазона 40-100 nm и друг в диапазона 800-1000 nm. Те ще се използват за получаване на хибридни материали със зададени свойства.
- По проекта **„Устойчиви катализатори на базата на зеолити за окислителни реакции“**, Двустранно сътрудничество с Индия (ФНИ) е извършена пост-синтезна обработка на AlZSM-5 и GaZSM-5 зеолити и е изследван ефектът на третиране с флуориден буферен разтвор върху образуването на вторични пори в синтезираните кристали, както и върху каталитичните свойства в реакциите на трансформация на m-ксилен и диспропорциониране на толуен. Установено беше, че оптималните параметри за успешно флуоридно третиране на изследваните материали е третиране в продължение на 20 минути при стайна температура с използване на буферен разтвор на NH₄F и 0,25 M HF. Като следствие от тази обработка се повишава образуването на мезопорите в диапазона от 5–40 nm за алуминиевите проби и 7-50 nm за пробите с галий. Обемът, дължащ се на мезопорите, се увеличава с до 67 % в сравнение с първоначалните проби. Такова третиране на Ga заместен зеолит се прилага за първи път. Ролята на образуваните мезопори при третирането е ясно демонстрирана от значително повишената каталитична активност на третирания AlZSM-5 зеолит в сравнение с необработения зеолит AlZSM-5 в диспропорционирането на толуен, т.е. третирането има благоприятен ефект за реакции, чието протичане изисква по-голям обем на порите.
- По проект **„Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“ - E+**, Институтът по катализ участва в Работен пакет 2: Горивни клетки и Работен пакет 4: Каталитични методи за конверсия на CO₂ и получаване на водород от възобновяеми суровини или отпадъци.

Работен пакет 2:

Задача: Разработване на концепция за подобряване на каталитична активност на електродите за елиминиране недостатъците на класическата керамична технология е синтезиран Ni-съдържащ керамичен анод за протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки с анодна керамична матрица итрий-дотиран бариев цеарат. Използваният метод е в състояние да замени класическата керамична технология за получаване на кермет на база NiO, тъй като предлага ниско енергиен и лесно контролируем синтез, осигуряващ по-хомогенно разпределение на металния Ni в керамичната матрица, както и отсъствие на вторични фази с диелектрични свойства, каквито са регистрирани при прилагането на класическата керамична технология. Този подход на синтез осигурява силно взаимодействие метал/носител, което

активира електрохимичната реактивност на никела, фактор за подобряване на електрохимичните характеристики на анода, както и за повишена анодна стабилност, предпоставка за по-слаба деградация в работни условия.

По Работен пакет 4 се изпълняват следните задачи: реформинг на метан с CO_2 (сух реформинг на метан), пречистване на водород посредством процесите на конверсия на CO с водна пара и селективно окисление на остатъчния CO в богата на водород среда, улавяне на CO_2 . В рамките на първата задача са получени високо активни и резистентни на коксообразуване катализатори за реформинг на биогаз до водород на основата на Ni -съдържащи хидроталкитни структури, $\text{HT}(\text{Mg-Al})$ с или без добавка на благороден метал. Изучена е структурата и повърхностните свойства на Ni -съдържащи хидроталкитни катализатори и влиянието на тези им свойства върху поведението в каталитичния биогаз реформинг. По втората задача са разработени злато модифицирани Ni-Al слоести двойни хидроксиди и злато модифицирани Ni-Al слоести двойни хидроксиди с добавка от магнезий и цериев оксид за реакцията на КВОП. Синтезирани са и е изучено каталитичното поведение на сребърни катализатори чрез нанесени на различни носители (Al_2O_3 , SiO_2 , ZSM-5 ($\text{Si:Al}=100$)) за реакцията на селективно окисление на CO в богата на водород смеси.

- По проекта **“Синтез на оксидни материали с приложение във фотокатализа”** беше изследвано фотокаталитичното поведение на механохимично обработената проба $\text{TiO}_2/\text{CeO}_2/\text{ZnO}$ (съотношение 1:1:1) за разграждане на три багрила (Малахитово Зелено, Реактивно Черно 5 и Бромотимол Синьо) като моделни замърсители във водни разтвори (7 ppm) под действието на УВ светлина. Резултатите показаха, че малахитово зелено демонстрира най-висока степен на разграждане (74%) при 120 минути УВ облъчване в сравнение с другите тествани багрила - реактивно черно 5 (52%) и бромотимол синьо (42%). Изследвана е фотокаталитичната способност на дотиран със сребро (0.3 тегл.%) $\text{Ce}_4\text{O}_7/\text{ZnO}/\text{La}_2\text{O}_3$ материал, получен чрез метода на съутаяване и с помощта на Плуроник P123, последвано от термична обработка при 500 °C, при разграждането на Реактивно Черно 5 и Нафтаденово Черно 10В багрила като замърсители във водни разтвори (5 ppm) под действието на УВ светлина. Сравнителните фотокаталитични изследвания установиха, че дотирания със сребро $\text{Ce}_4\text{O}_7/\text{ZnO}/\text{La}_2\text{O}_3$ материал показва по-висока фотокаталитична активност към разграждане на Реактивно Черно 5 в сравнение с Нафтаденово Черно 10В. След 150 минути УВ облъчване тестваните багрила - Реактивно Черно 5 и Нафтаденово Черно 10В се разграждат 78% и 31% в присъствието на дотирания със сребро $\text{Ce}_4\text{O}_7/\text{ZnO}/\text{La}_2\text{O}_3$

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 термодинамичната стабилност на системата Ga-Mg-H с подсистеми Ga-H и Mg-H с оглед приложимостта ѝ за съхранение на водород. Пресметнати са фазовите диаграми на реакцията $\text{Ga}(\text{GaH}) + \text{MgH}_2 \rightleftharpoons \text{MgGaH}_4$ (нестабилна) $\rightleftharpoons \text{MgGa}_2 + \text{MgH}_2$.
- Въз основа на курса за обучение на млади научни сътрудници и докторанти, „Въведение в компютърната химия I - Моделиране на молекулни системи” от лекции и практически упражнения с комплексни методи за теоретична симулация на молекулни системи (проведен 2019 г.) е разработено и инсталирано приложение в мрежата на Института по катализ за ползване от изследователите от ИК и ИОНХ.
- Разработва се метод за изследване на кристални системи в рамките на теорията на функционала на плътността и бази данни за кристални съединения. Моделът на този метод (OQMD) и базата данни ще се инсталират на малък пилотен клъстер в Института по катализ.

- През изтеклата 2020 година продължи разработката на принципа на boundedness въведен от М. Колева в излязлата от печат през 2012 година авторска монография на Мария К. Колева “Boundedness and Self-Organized Semantics: Theory and Applications” IGI-Global, САЩ.

Доказано беше, че естествено възникващата в рамките на теорията на boundedness семантична интелигентност, автономно самоподдържа ограничена логическа и числена грешка по всяка възможна семантична траектория. В резултат, това води до еднаква еволюционна стойност на всяка семантична траектория в дългосрочен план. Това свойство води до неприложимост на принципа на “оцеляване на най-приспособените” в ролята му на единствена оптимална траектория към семантичната интелигентност.

На базата на доказаната от М. Колева основна теорема в теорията на boundedness е предложен общ критерий за автономно разделяне на корелации от различен произход: причинно-следствени, случайни или произхождащи от индивидуални особености. Критерият е приложим за всяка комплексна система независимо от произхода ѝ. Например, той е приложим както за климатични феномени, така и за изследване на електрокардиограми и енцефалограми и финансови зависимости.

Научните изследвания по научно направление 2 от научно изследователския план за 2018-2020 г. „Разработване на каталитични процеси и нови ефективни наноразмерни катализатори за получаване на чиста енергия и горива“ включва две научни 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 беше намерена корелация между химичен състав, структура и каталитичните свойства на монометални и биметални PdNi хидроталкитни катализатори за реформинг на метан с CO₂. Установено беше, че независимо от наличието на отложени въглеродни остатъци от аморфен и графитов вид на повърхността на отработените катализатори, те показват висока конверсия на CH₄ и CO₂ в реакцията на сух реформинг на метан, както и молно отношение H₂/CO $\cong$ 1, подходящо за Фишер-Тропш синтез. Това е свързано с равномерното разпределение на активните метални частици на повърхността на катализатора, позволяващ по-добър достъп на реакционните молекули
- По проект „Дизайн и приложение на метало-оксидни системи”, NiAl слоест двоен хидроксид (СДХ) (молно съотношение Ni²⁺/Al³⁺=2.5/1) беше модифициран чрез частично изоморфно заместване на Ni²⁺ йоните със същото количество Mg²⁺ йони, да се запази съотношението Ni²⁺ + Mg²⁺/Al³⁺=2.5/1. Тези системи бяха изследвани като катализатори и носители на златни катализатори за получаване на водород чрез реакцията конверсия на въглероден оксид с водна пара (КВОВП). Установено беше, че частичното заместване на Ni с Mg води до умерена активност на NiMgAl и Au/NiMgAl катализатори поради: (i) по-малкото количество Ni, което не може да осигури достатъчен брой каталитично активни места; (ii) по-високата термична стабилност, предизвикваща създаването на активните никелови структури при по-високи температури и (iii) частична регенерация на слоестата структура под влияние на реакционната среда, присъствието на Mg и дребните златни частици. Изяснена е благоприятната роля на златото върху активността на Au/NiAl катализатор. Показано беше, че получаването на водород чрез реакцията на КВОВП е в зависимост от количеството никел, наличието на магнезий и количеството на злато в катализаторите. Отлагането на най-голямото количество злато на повърхността на NiAl катализатор осигурява изобилие от активни места и показва респектираща активност при КВОВП.

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 Полската академия на науките са изследвани с рентгенова фотоелектронна спектроскопия медни катализатори, нанесени на смесени оксиди $\text{CeO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ (30 т. % CeO_2), както и на модифицирани с Y_2O_3 (1 т. % по отношение на CeO_2) $\text{CeO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, получени чрез импрегниране или механохимично смесване. Анализът показва, че свежите образци съдържат Cu^{2+} йони, а в тестваните в реакцията на конверсия на CO с водна пара (КВОВП) образци се регистрира допълнително и метална мед (Cu^0). Сравнението на атомните отношения Cu/Ce , Cu/Al , Y/Ce и Y/Al показва, че импрегнирането благоприятства формиране на повърхностна цериевооксидна фаза, обогатена с Cu - и Y йони, която покрива носителя (Al_2O_3). При механохимичното смесване цериевооксидните частици се разпределят неравномерно, като остават и свободни зони от Al_2O_3 , където има нанесени CuO и Y_2O_3 без близък контакт с CeO_2 . Установено беше, че взаимодействието $\text{Cu}^{2+}\text{-O}_{\text{vac}}\text{-Ce}^{3+}$ /или Y^{3+} играе решаваща роля както за редуцируемостта, така и за каталитичната активност. Обяснено беше положителното влияние върху активността на механичното смесване като подход при синтеза на оксидните носители.
- По проекта **„Волфрам-, молибден-, рений- съдържащи катализатори за получаване на водород от сяросъдържащи газове: синтез, модифициране и каталитични свойства“**, е проведена в отсъствие на сяра в реакционната смес при висока температура 400 °C и различни обемни скорости реакцията на КВОВП с цел бърза проверка на активността на киселите Mo -, W - и Re -съдържащи катализатори. Това изследване дава информация за каталитичното поведение на катализаторите при злополука по време на работа. Три-компонентните KCoMo и KCoRe катализатори притежават най-ниска зависимост от сяра на тяхната активност и стабилност при дезактивиране, което е индикация за приложимостта на тези две системи като оптимални кисели катализатори за КВОВП.
- По проект **„Интегриран подход за получаване на чист водород с оползотворяване на парниковия газ CO_2 “** с ФНИ е изучено влиянието на метода на нанасяне (съутаяване или импрегниране) на металния компонент Ni към Mg-Al носители с хидроталкитна структура (НТ), както и ролята на добавения благороден метал Pd върху физикохимичните и каталитични свойства на образците в реакцията на “сух” реформинг на метан (СРМ). Анализът на каталитичното поведение на монометални Ni и биметални PdNi катализатори показва, че всички катализатори демонстрират висока конверсия на CH_4 (над 80 %), като най-висока е тази на Ni/НТ , като и отношението H_2/CO е близо до 1. Стойностите на конверсия на CO_2 на отделните катализатори са по-високи от тези на CH_4 , което се дължи на протичане на обратната реакция на КВОВП. 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 нм на повърхността на носителя. Ефектът от добавянето на Pd върху каталитичните свойства е по-забележим при катализатора Pd/NiНТ .
- Обобщени са резултатите от изследване на ролята на метода на получаване (импрегниране или механохимично смесване) на смесени Ce-Al оксиди, в т.ч. и след модифициране на CeO_2 с Y_2O_3 , върху каталитичната активност на злато-съдържащи образци в реакцията на КВОВП. В допълнение към охарактеризирането с комплекс от физикохимични методи – прахова рентгенова дифракция, трансмисионна електронна спектроскопия, рентгенова фотоелектронна спектроскопия, температурно- програмирана редукция е проведено и изследване с електронен парамагнитен резонанс. В публикуваната статия е предложено обяснение на каталитичното поведение с участието на тези активни кислородни форми в т.н. кислород-асистирана реакция на КВОВП. Синтезирани от въглищна пепел зеолити са импрегнирани с амини с цел повишаване на сорбционния капацитет по отношение на CO_2 . Изследвани са модифициращите свойства на моноетаноламин, изопропаноламин и

етилендиамин. Анализът на адсорбционно-десорбционните процеси в температурния интервал от стайна температура до 130 °C показва, че най-ефективна е обработката с изопропанолламин, която води до трикратно повишаване на капацитета в сравнение с този на немодифициран образец.

- По проект „Разработване на нови активни и рентабилни катализатори за процес за получаване на чист водород, интегриран с оползотворяване на CO₂“ с Институт по наноматериали, Палермо, чрез рентгенова фото-електронна спектроскопия е анализирано окислителното състояние и повърхностната концентрация на Au, Ni, Ce и Al в злато-съдържащи образци, нанесени на Ni-Al слоести двойни хидроксиди, модифицирани с CeO₂. Установено е, че златото е в метално състояние (BE 84.4- 84.7 eV) и запазва високо дисперсното си състояние след реакцията на КВОВП. Съвместното присъствие на Ni²⁺ и Ni³⁺ йони в отработения катализатор потвърждава хипотезата за протичане на реакцията на КВОВП по механизъм, включващ окси-редукционния преход Ni²⁺ ↔ Ni³⁺, придружен от адсорбция и активиране на CO върху златните наночастици. Промотиращата роля на добавката от CeO₂ се свързва със способността за лесен обмен Ce⁴⁺ ↔ Ce³⁺ в зависимост от окси-редукционния потенциал на средата и формирането на кислородни ваканции, които играят важна роля при дисоциацията на водните молекули.

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.

- В заключителния етап на проекта „Решения за критични суровини, използвани в материали, работещи при екстремни условия“, COST Акция OC-2015-1, успешно завършиха съвместните изследвания с участващите научни и технологични екипи от различните страни-участнички за решаване на поставените иновативни задачи и заместване на критичните материали при разработването на активни катализатори. Представителят на страната в ръководството на COST акцията, който е от колектива на Института, проф. З. Черкезова-Желева има съществен принос за подготовката на финалния отчет на проекта, както и за подготовката и успешното кандидатстване за нов иновативен проект COST Innovators' Grant (CIG) с акроним ITHACA. Проектът е добър пример за силните български позиции в COST акция с участие в ръководството му и с пряката ангажираност за повишаване на квалификацията на младите изследователи и подобряване на възможностите за успешната им научна кариера. Подготвен, подаден и спечелен е нов научно-приложен проект по конкурс H2020-MSCA-RISE с акроним SHeMPPGM. Проектът има пряка връзка с приоритетите на РП Хоризонт 2020 в областта на научните изследвания и иновациите.
- По проекта „Комплексно изследване на фини прахови частици в атмосферата чрез лидарно локализиране на време-пространственото им разпределение, характеризирание по състав, структура, морфология и микробно съдържание“ с ФНИ бяха проведени сравнителни изследвания на замърсяването с фини прахови частици (ФПЧ) на въздуха в град София в периоди на интензивен трафик и в периоди на намален трафик при налагането на карантина поради КОВИД-19 пандемията в две ключови места на града: бул. Цариградско шосе - района на „4-ти километър“ - пл. „Орлов мост“, както и бул. „Драган Цанков“ - Биологически факултет на СУ. Физикохимичното характеризирание на събраните и селектирани по размери ФПЧ показва високата им хетерогенност и комплексност на материалите, както и различния характер на източниците на замърсяване на въздуха през двата периода. Въз основа на проведените анализи на ФПЧ е разработена методология за систематичното им изследване. Детайлна информация за изследваните ФПЧ е получена въз

основа на Мьосбауеров 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 през изследваните периоди. За целите на проекта получените резултати от изследване на ФПЧ са сравнени с данните на Министерство на околната среда и водите на България, както и с наблюденията на гражданските организации на същите места в града през същите периоди.

- Работата по проекта **„Механохимия за устойчива индустрия“**, COST Акция CA 18112, Mechanochemistry for Sustainable Industry, АКРОНИМ: Mech@SustInd, 2019 – 2023 г., беше свързана с установяване на сътрудничество и стартиране на съвместни изследвания на участващите научни и технологични екипи от различните страни-участнички с цел решаване на конкретни иновативни задачи за използване на широките възможности на механохимията при разработването на катализатори за фармацевтичната индустрия. Участието на представител на страната и ИК-БАН в ръководството на COST акцията, допринесе за повишаване на иновативната готовност на стартиращите изследвания по проекта с предварително въвеждането на стандартизационни процедури на експериментите. Екипът от ИК активно се включи в редовно провежданите уеб-базирани срещи по проекта, които замениха присъствените мероприятия в условията на блокирани срещи поради пандемията от КОВИД-19.
- По проект **„Механохимия за устойчива индустрия“**, Договор КП-06-КОСТ/18 от 2019 г., съфинансиране по COST акция CA 18112, бяха стартирани серии от паралелни изследвания за ролята на различните параметри на механохимична активация при получаването на наноразмерни желязосъдържащи катализаторни материали за получаване на активни фармацевтични съставки, както и за тяхното разграждане при почистване на отпадни води. В резултат на проведените първоначални физикохимични анализи са установени механохимичните трансформации на материалите в зависимост от условията на обработка. Определен е кристалохимичния състав и дисперсността на образците. Подготвени за провеждане са изследвания за фотокаталитично почистване на отпадни води с използване на получените материали.
- Работата по проект **„Иновативни и устойчиви технологии за намаляване на зависимостта от критичните суровини, използвани в материали с приложение за по-чист транспорт“**, COST Акция COST INNOVATORS' GRANT IG15102, АКРОНИМ: ITHACA, 2020-2021 г. беше свързана с повишаване на иновационната готовност на трите продукта, заложили като цел на проекта. Изготвянето на маркетингов план, план за продажбите и бизнес план, SWOT анализ, оценка на капацитета и др. бяха сред поставените задачи, разработвани в колаборация с другите участващи научни и технологични екипи от страните-участнички в проекта. Представителят от състава на ИК-БАН в ръководството на COST акцията е пряко ангажиран с повишаване на квалификацията на младите изследователи и подобряване на възможностите за успешната им кариера в областта на науката и иновациите. Като отговорник за подготовка и провеждане на училище по проекта, са проведени организационни дейности за планиране на училище по проекта в началото на следващата година: проведени са разговори и са ангажирани като лектори водещи учени и иноватори, изготвена е програма за мероприятиято, ангажирани са както организация-домакин на училището, така и уеб-платформа за провеждането му като смесено или виртуално събитие. Екипът от ИК активно се включи и в редовно провежданите уеб-базирани срещи по проекта, които замениха присъствените мероприятия в условията на блокирани срещи поради пандемията от КОВИД-19.
- Стартирането на проект **„Химия на металите от групата на платината“**, Horizon 2020, Marie Skłodowska-Curie Research and Innovation беше отложено с половин година поради КОВИД-19 пандемията и невъзможността за изпълнение на работните задачи и осъществяване на планираните командировки. Екипът от ИК активно се включи в провежданите уеб-базирани срещи по проекта, които замениха присъствените мероприятия в условията на пандемията от Ковид-19.

Задача 2. Приложна и фундаментална ЕПР спектроскопия

- По проект „ЕПР дозиметрия“ бяха продължени и задълбочени изследванията на захароза като радиационно чувствителен материал за дозиметрия. Изследванията са проведени в две насоки: 1) стабилност на радиационно индуцираните свободни радикали и 2) определяне на оптимални размери на цилиндрични твърдо тяло ЕПР дозиметри без използване на вътрешен стандарт. Установено беше, че свободните радикали в облъчена захароза се регистрират дори 6 години след радиационно третиране и стабилността им зависи от начина на съхранение на пробите. Тези резултати показват, че захарозата може да се използва много успешно като дозиметричен материал както за аварийна, така и за ретроспективна дозиметрия. Изследвани бяха твърди цилиндрични ЕПР дозиметри съдържащи 60 % захароза и 40 % парафин с различни размери (диаметър 2, 3 и 4 мм и височина 5, 10 и 14 мм).
- По проект „ЕПР анализ на хранителни продукти“ са изследвани проби от пчелен хляб (перга) като са сравнени свободните радикали и антиоксидантната активност преди и след облъчване с 5, 10 и 20 kGy. В пчелния хляб се регистрира спектър от Fe (III), а след облъчване гама-лъчите индуцират свободни радикали, чиито сигнал нараства с приложената доза. Стабилността на свободните радикали е проследена за 4 месеца след облъчване, като се наблюдава постепенно намаляване на интензитета. След този период не е възможно да се докаже радиационна обработка. Изследван беше ефектът от гама облъчване на пчелен хляб върху антирадикаловата му активност, използвайки стабилния свободен радикал 1,1-дифенил-2-пикрилхидразил (DPPH). За охарактеризиране и сравняване на антиоксидантната активност на екстрактите бяха определени стойностите на IC₅₀ параметъра, както и антиоксидантния капацитет на необлъчените и облъчените проби спрямо Тролокс еквивалент. Изследвано е влиянието на разтворителя при получаване на екстракти от пчелен хляб, облъчен с различни дози, върху DPPH радикал улавящата им активност. Резултатите показаха, че при пробите разтворени в по-концентриран алкохолен разтвор се наблюдава по-голяма антирадикалова активност спрямо DPPH радикалите.
- По проект „ЕПР в катализа“ с помощта на ЕПР спектроскопия бяха охарактеризирани различни каталитични материали с цел определяне на окислителното състояние на металните йони в тях и взаимодействието им с обкръжаващата ги среда. Изследвани бяха проби съдържащи Ni, Ce, Cu, Fe, Au, Y нанесени върху носители като: Al₂O₃, SiO₂, TiO₂ и тествани в различни каталитични реакции. Изследвани са и проби от ZnO₂, както и ZrO₂ легиран с редкоземни елементи (Sm, Gd), преди и след обработка с аргон в присъствие на водород при 600 °C, с цел охарактеризиране на окислителното състояние на Zn и Zr и формирането на дефекти в структурата на каталитичните материали. С помощта на ЕПР спектроскопия беше установено наличието на кислородни радикали в изследваните материали. В съвместно изследване с колеги от Техническия университет София са изследвани проби, съдържащи фини прахови частици от изгаряне на биомаса. С ЕПР спектроскопия беше определено наличие на желязо, манган и сажди в тях.
- 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, на ЕПР анализ бяха подложени черупки от бадеми и орехи преди и след гама-стерилизация. Изследвана е кинетиката на затихване на радиационно-индуцираните сигнали в черупки от бадеми и орехи. Не се наблюдава значителна разлика в кинетичното поведение на пробите облъчени с 10 и 25 kGy гама лъчи. Изучено е влиянието на облъчването с различни дози върху радикал-улавящата активност на бадеми и орехи посредством ЕПР спектроскопия. Резултатите показват, че орехите имат значително по-голяма антиоксидантна активност от тази на бадемите.

- По проект „Разработване и усъвършенстване на нови подходи за качествена и количествена оценка на радиационно третиране на базата на ЕПР спектроскопия“, ФНИ, беше изследван ефектът от облъчване с различни дози гама лъчи върху антиоксидантната активност и кинетиката на затихване на индуцираните свободни радикали в две реколти пчелен прашец и пчелен хляб (перга) с ЕПР спектроскопия. Спектрофотометрично е определено общото фенолно и фланоноидно съдържание в тях, а с високо ефективна течна хроматография са установени основните групи фенолни съединения, както и промяната в техните концентрации в зависимост от дозата на облъчване. Изследвани са твърдо тяло ЕПР дозиметри с различна форма и са установени оптималните им размери. Изследвани са смеси на захароза и аскорбинова киселина в различни съотношения. Установено е, че интензитета на ЕПР сигнала на захарозата намалява с нарастване на концентрацията на аскорбиновата киселина в сместа. Това показва, че поради радикал улавящите й свойства, аскорбиновата киселина играе ролята на радикал улавящ агент спрямо свободните радикали в захарозата.

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

- По проекта по Двустранно сътрудничество с Русия, ФНИ „Синтез и изследване на молекулни и супрамолекулни устройства на основата на спиронафтоксазини, хромени и стирилови багрила“ беше синтезиран, охарактеризиран и изследван супрамолекулен комплекс на фотохромен бензопиран със съединение от нафтиламидов тип. Полученият комплекс обратимо променя цвета си при облъчване с УВ светлина и съответно след премахване на облъчването. Комбинацията от две функционални молекули в супрамолекуления комплекс влияе както върху фотохромните, така и върху флуоресцентните характеристики на компонентите на системата. Отворената форма на получения комплекс показва значително по-висока скорост на термично обезцветяване, отколкото тази на свободния бензопиран. Флуоресценцията на комплекса може да се включва и изключва чрез фотоиндуцирано преобразуване между затворената и отворената форма. Предполагаема причина за флуоресцентното фотопревключване е процес, свързан с фотоиндуциран електронен трансфер между бензопирана и нафтиламидния компонент на супрамолекуления комплекс. Проведеното изследване показва, че супрамолекулярният подход може да бъде използван за получаване на системи, при които има взаимно влияние между фотохромните и флуоресцентните компоненти в комплекса.

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

- По темата „Фотокатализ и УОП“, беше разширен обхвата на приложение на комбинирания подход на Тагучи-Грей (планиране на експеримента чрез ортогонални матрици на латинските квадрати и регресионен корелационен анализ на входните параметри). Подходът беше приложен към нов обект – суспензионен полустатичен фотокаталитичен реактор за почистване на отпадъчни води. За разлика от предишното изследване (Bulgarian Chemical Communications Vol.52, Issue 2, pp.305-309 (2020)) в което подходът бе приложен към проточен плосък плочест фотокаталитичен реактор за почистване на замърсен въздух (5 входни параметъра на 5 нива и 32 експеримента OA L32), тук броят на входните параметри при водния реактор бе по-малък – 4 параметъра на 3 нива. Използувана беше ортогонална матрица L9 (OA34), при която се планират 9 експеримента. Четирите параметъра на вход в реактора бяха началната концентрация на моделния замърсител P1 – азобагрилото AB194 (кисело металокомплексно хромено черно, Костинброд), типа на осветяване P2 (УВ-А, УВ-С, видима светлина), интензитета на разбъркване P3 на суспензията с магнитна бъркалка, дебит на подаване на кислорода към реактора P4. Прилагайки корелационния анализ на Грей бе изведен

статистически математичен модел и бяха определени регресионните коефициенти показващи влиянието на входните параметри върху функцията на отклика т.е. степента на обезцветяване на разтвора на багрилото. Анализът показва, че най-висока степен на обезцветяване се постига при най-ниската концентрация на багрилото (1ммол/л), УВ-С осветяване 0.07 вата на см², 600 оборота в минута на бъркалката, докато увеличаването на дебита на кислорода над 10 л/час не дава съществено увеличение на конверсията, вероятно поради големия стехиометричен излишък. Валидирана бе адекватността на модела на база процента на грешката чрез прилагане на ANOVA (ANALYSIS OF VARIANCE). Затруднената дифузия понижава степента на превръщането.

- По проект **„Нови каталитични материали за очистване на замърсители на въздуха“**, ФНИ, съфинансиране по COST Акция СА 17136 бе установено е, че промотирането със злато на смесени Cu-Se оксиди, нанесени на γ -Al₂O₃ води до получаването на ефективни катализатори за пълно окисление на бензен. Нанесените златни наночастици повишават мобилността на кислорода от повърхността на цериевия диоксид, доказана чрез изследване с температурно-програмирана редукция. Съставът на смесените оксиди (молно отношение Cu:Se=2:1 и 1:5) оказва значителен ефект върху активността за златните катализатори. По-ефективен е образецът с по-високо съдържание на цериев диоксид (90% превръщане на бензена при 200 °C), поради наличието на фино дисперсни златни частици и високата концентрация на парамагнитни Cu²⁺ йони, регистрирани в ЕПР спектрите.
- За изпълнение на целите на **COST Акция СА 17136 „Indoor air pollution network“ (Мрежа за качество на въздуха в затворени помещения)** през изминалата година продължи участието в онлайн заседание на Управителния съвет и срещи за изготвяне на доклад на работна група 3b за идентифициране на замърсители на въздуха в затворени помещения, получени в резултат на каталитични и фотокаталитични реакции, както и на емисии от т.н. „зелени материали“ (бои, покрития, части от вътрешността на автомобилите).
- 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 бяха синтезирани въглеродни ксерогели/въглеродни нанотръби (CX-CNT) нанохибриди и върху тях бяха нанесени титанови частици като източник на фотокатализатор (CX-CNTs-Ti) за отстраняване на багрилото метиленово синьо от отпадъчни води. Установено беше, че модифицираният с TiO₂ въглероден нанохибрид проявява отлични адсорбционни свойства. Титановите частици действат като активни центрове и са ефективни за повишаване на фоторазлагането на метиленовото синьо във воден разтвор в условия на тъмнина и светлина.
- При изпълнение на 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 Cu_{1-x}Ni_xFe₂O₄ синтезирани по зол-гелен 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 редукционно-окислителни свойства и отлична каталитична активност в реакция на пълно окисление на етилацетат. Синтезирани са също и материали от активен въглен, модифицирани с TiO₂ по зол-гелен метод. Първоначалните тестове показват обещаващи фотокаталитични свойства при очистване 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 „Подобри композитни фотокатализатори за разграждане на органични замърсители във вода, активиращи се чрез UV-светлина на основата на TiO₂ и графенов оксид с нанесени благородни метали“, Национална програма за „Млади учени и постдокторанти“ беше проведено обучение за работа с анализатор за общ органичен въглерод във води замърсени с органични съединения TOC Shimadzu. Използвани бяха два метода за анализ: едноточкова калибрационна крива и многоточкова калибрационна крива. Двата метода са приложени както за ТС анализ, т.е. общ въглерод и IC анализ за неорганичен въглерод в мг/л. Обучението беше проведено при задаване на стойностите на параметрите в режим Initial Display.

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.

Основните научно-изследователски приоритети и направления в ИК, съгласно приетата през 2018 година Стратегия за развитие на ИК до 2030 г., са в тясна връзка с основните приоритети на Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България (2017-2030 г.), Стратегията за развитие на БАН (2018-2030 г.) и Иновационната стратегия за интелигентна специализация (2014-2020 г.). Научноизследователският план на ИК е тригодишен и обхваща периода от 2018 до 2020 г. Той включва три основни научно-приложни 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.

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

През 2020 г. ИК продължи своето участие като партньор в два консорциума, одобрени за финансиране по Приоритетна ос 1 на Оперативната програма „Наука и образование за интелигентен растеж“:

- „Национален център по мехатроника и чисти технологии“
- „Център за компетентност ХИТМОБИЛ „Технологии и системи за генериране, съхранение и потребление на чиста енергия“ (2019-2023 г).

От получените средства по проект BG05M2OP001-1.001-0008-C01 „Национален център по мехатроника и чисти технологии“ беше закупена клетка за *in situ* измервания с Мьосбауерова спектроскопия.

Чрез финансирането получено през втория етап на проекта ИНФРАМАТ, включен в Националната пътна карта, през 2020 година в Института беше закупен газов хроматограф с два детектора: по топлопроводност и пламъчно-йонизационен, както е и ремонтирана лаборатория за каталитични изпитания.

Институтът по катализ участва в програмата Е+ по проект „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“, D01-214/2018. в Работен пакет 2: Горивни клетки и Работен пакет 4:

Каталитични методи за конверсия на CO_2 и получаване на водород от възобновяеми суровини или отпадъци.

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

В Институт по катализ се работи по четири проекти, финансирани от ФНИ пряко свързани с приоритет 2:

- „Комплексно изследване на фини прахови частици в атмосферата чрез лидарно локализиране на време-пространственото им разпределение, характеризирание по състав, структура, морфология и микробно съдържание“
- „Възобновяема интегрирана система за елиминиране на органични замърсители от води и въздух“
- „Комплексен подход за оценка на промените в биологично-активни вещества и антиоксидантния потенциал на облъчени растителни храни и билки. Нови протектори срещу гама-облъчване“
- „Разработване и усъвършенстване на нови подходи за качествена и количествена оценка на радиационно третиране на базата на ЕПР спектроскопия“.

През тази година учените от ИК участват в четири 3 проекта по програмата COST, 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 ръководители проф. д-р Т. Табакова и проф. д-р З. Черкезова-Желева.

През 2020 г. са синтезирани катализатори за опазване на околната среда с участие на хетерополи и хелатни съединения. Изследвани са 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. Изследвано е фотокаталитичното поведение на синтезирани нови наноструктурирани полупроводникови материали за очистване на въздух и води.

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 съответствие с националните и европейски приоритети в тази област и са насочени към изследванията на нови наноструктурирани материали с мултифункционални повърхности и наноматериали с контролиран дизайн и подобрени каталитични свойства. Проектите, по които се работи в тази насока през 2020 година са:

- „Получаване на алтернативни горива от възобновяеми въглерод-съдържащи суровини“
- „Разработване и охарактеризиране на нови активни и рентабилни катализатори за получаване на чист водород“
- „Волфрам-, молибден-, рений- съдържащи катализатори за получаване на водород от сяросъдържащи газове: синтез, модифициране и каталитични свойства“
- „Интегриран подход за получаване на чист водород с оползотворяване на парниковия газ CO_2 “
- „Разработване на нови активни и рентабилни катализатори за процес за получаване на чист водород, интегриран с оползотворяване на CO_2 “.

Важно място в целите на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2017-2030 в ИК-БАН има привличането и задържането на висококвалифицирани и мотивирани изследователи, както и грижата за научното израстване на младите учени в Института.

През 2020 година беше продължена работата по стартиралите предходната година два конкурса по НП „Млади учени и постдокторанти“, финансирана от МОН (1 млад учен и 1 постдокторант).

На национално равнище в рамките на конкурса „ФНИ -2020“ към МОН, ФОНД „НАУЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ“ бяха спечелени 2 проекта в научна област „Химически науки“, с базова организация ИК, като единият е в категория „Млади учени и постдокторанти“. През 2020 г. продължи изпълнението на проектите, финансирани от Фонд „Научни изследвания“ в Конкурса за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2017 г., 2018 г. и 2019 г: общо 13 проекта, три от които по Двустранно сътрудничество, 1 с Индия и 2 с Русия (един, от които бе спечелен през 2020 г.).

В ИК се работи по 8 проекта в рамките на междуакадемично сътрудничество и по 3 проекта в рамките на двустранните спогодби, финансирани от ФНИ.

Пряк резултат от работата са съвместни публикации с учени от тези организации в реномирани списания.

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 2020 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“. Във връзка с изпълнение на заложените дейности по проекта, ученици от НПМГ посетиха Института, като приложиха знанията си в реални условия. Изготвени бяха дидактически материали за работа в изнесена класна стая. След преминаване към онлайн обучение в училищата поради възникналата извънредна обстановка в страната, бяха изготвени 17 на брой електронни ресурси с нови дидактически материали, свързани с експерименти в домашни условия за 7, 8, 9 и 10 клас, които съответстват на практическите дейности от учебната програма, заложи за втория учебен срок. Ресурсите са публикувани на сайта на програмата: <https://educationwithscience.online/resource/домашни-х>. Сайтът на програмата беше популяризиран в групите на учителите по природни науки и изпратен на преподавателите от училищата, с които си сътрудничим.

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.

Научните изследвания в ИК са на базата на конкурсно-проектен принцип и са свързани с решаване на важни фундаментални проблеми в катализа и неговото приложение. Те са насочени към разрешаване на важни екологични и технологични проблеми. Разработките на учените се базират на ефективно използване на наличните суровини и създаване на нова суровинна база, усвояване на нови източници на енергия, изследване на нови системи за опазване на околната среда, дизайн и синтез на нови материали с предварително зададени свойства, разработване на нови и усъвършенстване на съществуващите технологии и процеси.

Научноизследователска дейност се развива съгласно приоритетите на каталитична наука в световен аспект. Резултатите от фундаменталните ни изследвания са намерили и намират международен отзвук и признание.

Колективът от учени в ИК провежда обществено значими научно-приложни изследвания, анализи и разработки, като:

- 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 интеркалиране 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; Институт по елементоорганични съединения, Москва, 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“, Петях 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 Българско каталитично дружество (БКД), обединяващо 123 специалисти, работещи в областта на катализа от научните институти, университети и индустрията в страната. БКД 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 2020 г.

Научната дейност на ИК е изградена на конкурсно-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 изпълнението на проекти. ИК участва в 3 COST акции: COST Акция COST INNOVATORS' GRANT IG15102 „Иновативни и устойчиви технологии за намаляване на зависимостта от критичните суровини, използвани в материали с приложение за по-чист транспорт“ и CA18112 „Механохимия за устойчива индустрия“ с координатор проф. д-р З. Черкезова-Желев с координатор проф. д-р З. Черкезова-Желева и CA 17136 „Мрежа за качество на въздуха в затворени помещения“ с координатор проф. д-р Т. Табакова, 16 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 8 проекта от конкурс „Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания“ с базова организация Институт по катализ, в 3 проекта по конкурса Институтът е съизпълнител и 1 проект с базова организация Институт по катализ в „Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания на млади учени и постдокторанти“. В ИК се работи по 3 проекта за Двустранно сътрудничество, финансирани от ФНИ, съответно с Русия-2, Индия-1.

Резултатите от научноизследователската дейност на ИК през 2020 година за публикувани в 47 научни труда, в това число 39 публикации в реферирани и индексирани от WoS и SCOPUS, като 2 публикации са в списания, които оглавяват ранглистата в съответната научна област, 17 научни публикации в издания, които попадат в категория Q1, но не оглавяват ранглистата, 5 в категория Q2, 8 в категория Q3 и 6 в категория Q4, 3 в рецензирани списания, неиндексирани в Scopus, WoS, ERIH+ и 1 научна публикации рецензирани тематични сборници, издадени от международни академични издателства. Приети за печат в издания, индексирани в WoS, Scopus, ERIH+ са 7 публикации.

През 2020 година 360 научни трудове на учени от Института са цитирани 1385 пъти в рецензирани 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.

Тази година, в условията на световната пандемия от Ковид 19 и с наложените рестрикции за пътуване, много от планираните научните форуми бяха отменени или проведени онлайн. През 2020 година са представени 2 доклада от проф. З. Черкезова-Желева на международни конференции (1 на 3rd International Conference on Emerging Technologies in Materials Engineering и 1 на Management Committee and Working Group Meeting of CA18112 Mechanochemistry for Sustainable Industry) и 1 от гл. ас. Ралица Младенова на 2nd Coatings and Interfaces Web Conference. Учени от Института са представили 8 доклада на международни научни форуми и 1 на национален научен форум, 9 постерни доклада на международни научни форуми, 6 постерни доклада на Юбилейната научна сесия, посветена на 100-годишнината от рождението на академик Георги Близнаков, 2 доклада и 3 постерни доклада на научната конференция „Изследователска инфраструктура в подкрепа на науката, технологиите и културата“, 1 постерен доклад на Единадесета научна сесия „Младите учени в света на полимерите“, 2 постерни доклада на XVII Научна постерна сесия за млади учени, докторанти и студенти и 1 лекция и 2 доклада на XIII-ти пролетен семинар - уебинар на младите учени и докторанти от БАН „Интердисциплинарна химия“.

През 2020 г. бяха публикувани в специален брой на списание „Bulgarian Chemical Communications“ материалите от 16-та Национална конференция по катализ на Българско каталитично дружество, посветена на 150-годишнината от основаването на БАН и 80-годишния юбилей на чл.кор.проф. дн Лъчезар Петров, а в „Catalysis Today“ избрани статии с резултати

представени на 12^{тия} Международен симпозиум по хетерогенен катализ (август 2018, София) с гост-редактори от ИК.

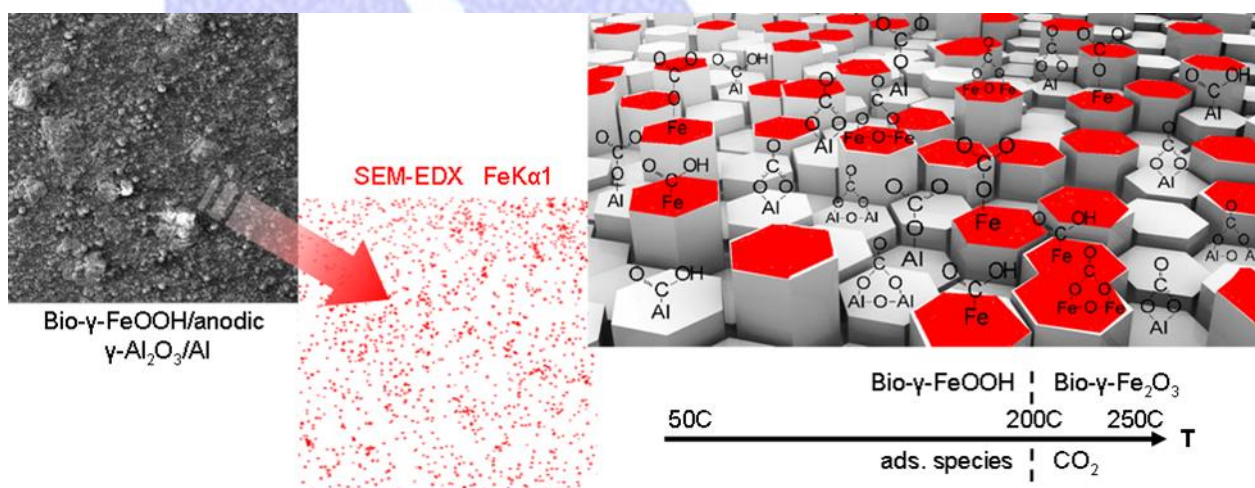
Традиционното гостуване на учени от Института като лектори и във връзка с изпълнение на задачи по съвместни проекти в чужди университети, изследователски центрове и фирми също беше възпрепятствано поради световната пандемия от Ковид-19.

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. Проф. д-р Зара Черкезова-Желева е национално контактно лице в Европейския научноизследователски съвет по Рамковата програма Хоризонт за Европа и на програмен комитет "в сянка" на ERC по Рамкова програма Хоризонт за Европа. През 2020 г. проф. Зара Черкезова-Желева е взела участие в Заседание на управителния комитет и работната група на COST Акция CA15102 15 „Решения за критични суровини, използвани в материали, работещи при екстремни условия“ на 16.01.2020 в Атина, Гърция, проведена в рамките на PROMETHEUS и в заключителната среща по проект „Решения за критични суровини, използвани в материали, работещи при екстремни условия“, COST Акция CA15102, 13-14.02.2020 в ENEA Casaccia Research Centre-Рим, Италия. След месец март е участвала във виртуални работни срещи по проект „Механохимия за устойчива индустрия“, COST Акция CA 18112 Mechanochemistry for Sustainable Industry Mech@SustInd, които замениха присъствените мероприятия в условията на пандемията от КОВИД-19.

2.1. Най-значимо научно постижение на ИК - БАН за 2020 г.

Характеризиране и каталитична активност в окислението на СО на биогенен лепидокрокит нанесен на аноден алуминиев оксид

Ръководители: доц. д-р Георги Кадинов и доц. д-р Мая Шопска



Чрез култивиране на бактерии Лептотрикс в хранителен разтвор на Лиске в присъствието на Al фолио покрито с аноден алуминиев оксид е получено нанесено биогенно желязо, съдържащо лепидокрокит, който е прекурсор за получаване на каталитично активния магхемит. Отлагането само на лепидокрокит измежду възможните модификации на FeOOH е резултат от състава на анодния алуминиев оксид, а именно съдържанието на γ -AlOOH. γ -AlOOH позволява хетероепитаксиално израстване на кристали γ -FeOOH. Получените покрития съдържат 0.6 и 0.9% биогенно желязо и не са плътни. Образците са тествани за каталитична активност в реакция на окисление на CO с O₂ до 250 °C. По време на процеса е регистрирано превръщане на лепидокрокит в магхемит. Отделянето на CO₂ при температури 200–250 °C е резултат от разлагане на карбонати (моно- и бидентатни) и

формати образувани върху слоя от алуминиев оксид и магхемит. Конверсията на СО не е висока, но резултатите говорят за потенциала на биогенния материал да бъде използван като носител или като катализатор след подходяща модификация.

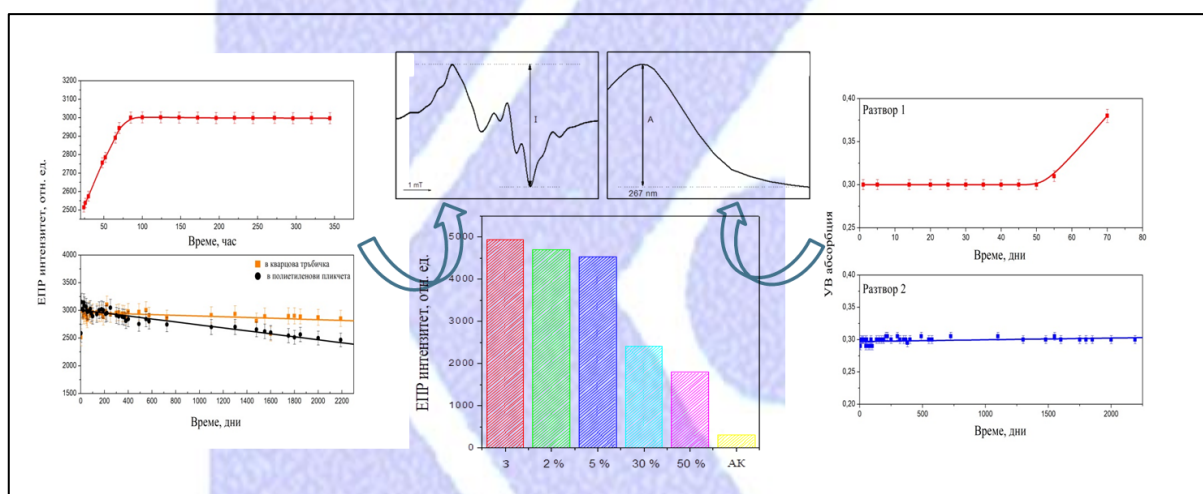
Разработката е отразена в:

Maya Shopska, Daniela Paneva, Hristo Kolev, Georgi Kadinov, Jaroslav Briančin, Martin Fabián, Zara Cherkezova-Zheleva, Ivan Mitov, Characterization and catalytic activity in CO oxidation of biogenic lepidocrocite layered on anodic alumina, Catalysis Today, 357 (2020) 436-441, doi-10.1016/j.cattod.2019.07.054

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение на ИК за 2020 г.

Захарозата като дозиметричен материал за ЕПР и УВ спектроскопия

Ръководител: доц. д-р Йорданка Каракирова



Високата стабилност на радиационно индуцираните радикали в захарозата предполага, че в момента тя е най-добрият кандидат сред твърдите материали за регулярна, аварийна и ретроспективна дозиметрия. В опит да се повиши ЕПР отклика на захарозата са изследвани нейни смеси с различни концентрации на аскорбинова киселина. Установено е, че поради антиоксидантните си свойства аскорбиновата киселина играе ролята на радикал улавящ агент и понижава количеството на свободните радикали в облъчената захароза. Това дава възможност за използването ѝ като радиопротектор.

Публикации:

1. Karakirova, Y., Yordanov, N. D. „Time dependence of the EPR and optical spectra of irradiated crystal sugar“ Radiation Physics and Chemistry, 168, 108569. Elsevier (2020), Q1
2. Karakirova Y., Yordanov N. D. „EPR Investigation of mix of sucrose and ascorbic acid irradiated with γ -rays“ Applied Magnetic Resonance, 51, 1041-1047. Yakov S. Lebedev: on the Occasion of His 85th Anniversary Springer (2020) Q3

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, Белград, Сърбия-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 резултатите 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 (CA 17136, CA 15102, CA18112)

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 Русия -2, Индия -1.

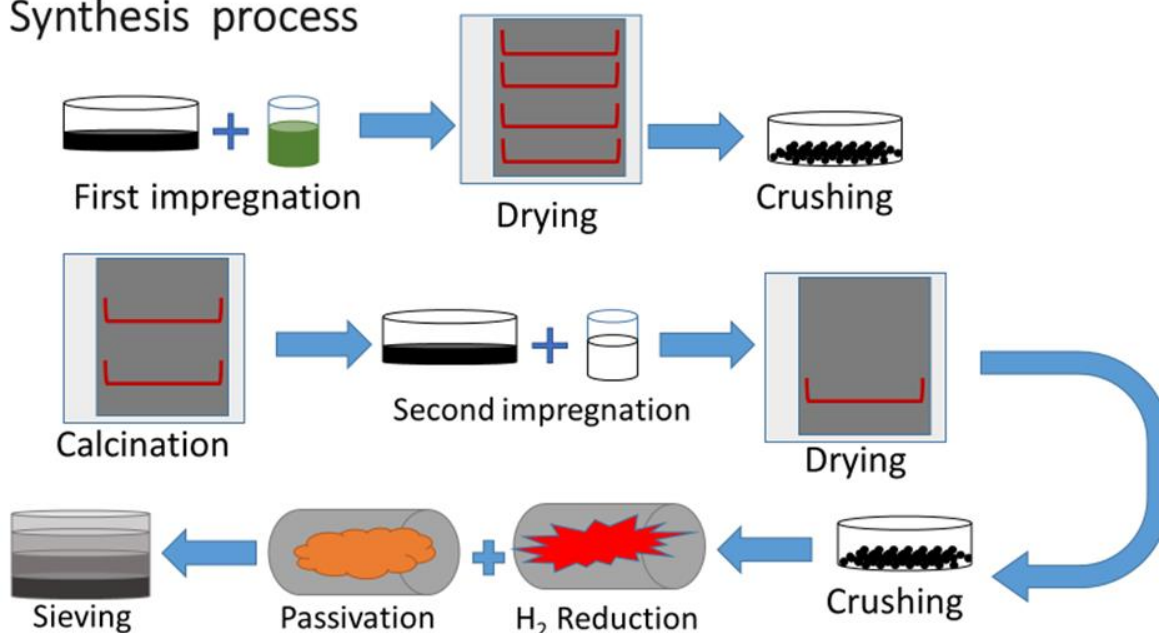
Значим международно финансиран проект за 2020 г.

Договор с GenCell Ltd, Петах Тиква, Израел:

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

Разработена е пътна карта за промишлен синтез на аноден никелов катализатор, съдържащ добавки от преходни метали, нанесен върху модифициран активен въглен. Избран е подходящ метод на импрегниране на компонентите за промишленото получаване на катализатора. Направени са изследвания за подобряване на условията за водородна редукция на каталитичната композиция.

Synthesis process



Пътна карта за промишлен синтез на аноден никелов катализатор

Ръководител на разработката от Институт по катализ – БАН: проф. дн Славчо Раковски, участници: проф. д-р Маргарита Габровска, доц. д-р Димитринка Николова, спец-химик Любима Билярска

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, както и обучение по програмата на МОН за студентски практики. През 2020 г. по темата „Дизайн на нови катализатори, с Со-модифициран цериев оксид, изследвани в реакция свързана с опазване на околната среда“ беше проведено практическо обучение на четирима студенти, трима от Технически университет-София и един от ФХФ СУ „Св. Климент Охридски“ от гл. ас. д-р Петя Петрова. В началото на годината ученици от столичните училища посетиха ИК и взеха участие в различни експериментални дейности под ръководството на учените от Института, участници в проекта „Химичният експеримент – метод, средство и условие за формиране на природонаучната грамотност в учениците“.

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.

От 2014 г., ИК има акредитация за обучение на докторанти по специалностите „Химична кинетика и катализ“ и „Химия на твърдото тяло“. Акредитацията е със 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. Във връзка с възникналата извънредна обстановка в страната през месец март 2020 г. се наложи промяна на планираните дейности по проекта. Изготвени бяха 17 на брой електронни ресурси с нови дидактически материали, свързани с експерименти в домашни условия, които съответстват на практическите дейности от учебната програма, заложили за втория учебен срок. Ресурсите са публикувани на сайта на програмата: <https://educationwithscience.online/resource/домашни-х>. Сайтът на програмата беше популяризиран в групите на учителите по природни науки и изпратен на преподавателите от училищата, с които си сътрудничим. След осъществена с тях обратна връзка, беше установено, че ресурсите за използвани от около 150 ученика от Първа Английска Езикова Гимназия – София с поставена оценка за практическа работа; 60 ученика от 68 СУ „Акад. Никола Обрешков“ - София; 120 ученика от СУ "Васил Левски" - гр. Елин Пелин. Пълна информация за използването на предоставените за дистанционно обучение материали може да бъде получена от web сайта на публикувания по програмата ресурс. Участник от екипа, доц. д-р Стела Минковска, представи онлайн презентация на тема: „Синтез на нови фотохромни спиронафтооксазини и техните възможности за комплексообразуване с метални йони“ пред учениците с профилирана подготовка от НПМГ „Акад. Любомир Чакалов“-гр. София.

В съответствие с непрекъснато променящите се обществени потребности и модернизиране на учебното съдържание, програмата е добра възможност за стимулиране интереса на учениците за активно участие в процеса на обучение. С въвеждане на електронното обучение се породи необходимостта от създаването на новата учебна среда, която да предостави възможност за организиране на ново ефективно обучение по предмета „Химия и опазване на околната среда“. В резултат на успешното изпълнение на задачите по проекта на Института по катализ-БАН е направено дарение от „АстраЗенека България ЕООД“.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО И АНАЛИЗ НА НЕЙНАТА ЕФЕКТИВНОСТ

В съответствие с класификацията на Центъра за иновации към БАН, по-голямата част от разработките на ИК през 2020 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 CO₂ 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 ЗВЕНТО

През 2020 г. ИК – БАН има приходи в размер на 5 901 лв. от отдаване сключени два договора за отдаване под наем на помещения 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, Инфрачервена спектроскопия, Диференциална сканираща калориметрия, Газова хроматография, Атомно абсорбционна спектроскопия, Ултравиолетови спектри по утвърден ценоразпис публикуван на интернет страницата на Института. За 2020 г. от сервизни услуги ИК има приходи в размер на 11 144 лв.

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ЗВЕНОТО ЗА 2020 Г.

№.	Наименование на приходите / разходите	Изпълнение
I.	ПРИХОДИ	75 439
1	Приходи от продажба на услуги, стоки и продукция	61 538
2	Приходи от отдаване под наем на недвижимо имущество	5 901
3	Текущи помощи и дарения от страната	8 000
II.	РАЗХОДИ	1 565 781
	Заплати и възнаграждение на персонала нает по трудови	
1	правоотношения	949 232
2	Други възнаграждения и плащания за персонала	158 508
	В т.ч. – за нещатен персонал по трудови правоотношение	25 550
	- за персонала в извънтрудови правоотношения	25 522
	- обезщетения с характер на възнаграждения	1 302
	- други плащания и възнаграждения	106 134
3	Осигурителни вноски от работодателя за ДОО	132 350
4	Здравноосигурителни вноски от работодателя	51 342
5	Вноски за допълнително задължително осигуряване	23 758
6	Издържка	156 090
	в т.ч. - материали	56 717
	- вода, горива и енергия	42 680
	- разходи за външни услуги	30 171
	- текущ ремонт	24 777
	- командировки в страната	532
	- командировки в чужбина	1 076
	- разходи за застраховки	35
	- други финансови услуги	102
7	Платени данъци, такси и административни санкции	5 901
9	Придобиване на ДА	141 993
	в т.ч. - компютри и хардуер	13 431
	- друго оборудване, машини и съоразения	128 562
III.	БЮДЖЕТНА СУБСИДИЯ	1 221 963
IV.	ТРАНСФЕРИ	519 665
V.	ФИНАНСИРАНЕ	
	в т.ч. - остатък по сметки от предходния период	248 778

VI. Средногодишна брутна работна заплата на едно лице

1 416

Приходи в размер на 11 144 лева от извършени услуги и анализи.

Приходи от договори за научни разработки с организации от чужбина – 50 394 лв. по договор с GenCell Израел.

Приход във връзка с „Национална програма – Млади учени и постдокторанти“ в размер на 29 904 лв.

Приходи по 8 договора с Фонд „Научни изследвания“ – 271 705 лв.

Приходи по договор ДСД-15 „Образование с наука“ – 4 500 лв.

Приходи по договор „Консорциум за изпълнение на Национална научна програма „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита (ЕПЛЮС)“ – 45 352 лв.

Приходи по договор „Разпределена инфраструктура от центрове за производство и изследване на нови материали и техните приложения, както и за консервация, достъп и е-съхранение на артефакти – ИНФРАМАТ“ – 125 000 лв.

Приходи във връзка с изпълнение дейностите по развитие на Център Върхови Постижения BG05M2OP001-1.001-0008 – 36 952 лв.

Наличност в СЕБРА към 31.12.2020 г. - 463 729 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. Юрий Кълвачев, проф. д-р, зам. директор на ИК-БАН
6. Татяна Табакова, проф. д-р, ИК-БАН
7. Александър Елияс, проф. д-р, ИК-БАН
8. Георги Тюлиев, проф. д-р, ИК-БАН
9. Зара Черкезова-Желева, проф. д-р, ИК-БАН
10. Маргарита Габровска, проф. д-р, ИК-БАН
11. Даниела Панева, доц. д-р, ИК-БАН
12. Йорданка Каракирова, доц. д-р, ИК-БАН
13. Маргарита Габровска, проф. д-р, ИК-БАН
14. Мая Шопска, доц. д-р, ИК-БАН
15. Стела Минковска, доц. д-р, научен секретар на ИК-БАН
16. Христо Колев, доц. д-р, ИК-БАН
17. Никола Малиновски, проф. дн, ИОМТ-БАН
18. Таня Цончева, проф. дн, ИОХЦФ-БАН
19. 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. БКД – Българско каталитично дружество;
4. ЕПР – Електронен парамагнитен резонанс;
5. ИФ – Иновационен фонд;
6. УВ-Ултравиолетова светлина;
7. ТПР- Температурно-програмирана редукция;
8. ТПС- Температурно-програмирано сулфидиране;
9. КВОВП - конверсия на въглероден оксид с водна пара;
10. ХТМУ – Химико-технологичен и металургичен университет;
11. ДМА – Дълготрайни материални активи;
12. РАН – Руска академия на науките;
13. РА – Румънска академия;
14. ПАН - Полска академия на науките;
15. ИОХЦФ-БАН- Институт по органично химия с център по фитохимия;
16. ПУ- Пловдивски университет;

