

**ИНСТИТУТ ПО КАТАЛИЗ
БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ**

=====

**ИЗВЛЕЧЕНИЕ ОТ
ОТЧЕТЕН ДОКЛАД
за 2021 г.**



Януари, 2022 г.

УВОД

Институтът по катализ има заети общо 58 щатни бройки. Разпределението на служителите по категории е следното: професори - 7, доценти - 10, главни асистенти – 8.5, научно-помощен персонал с висше образование – 16.5, администрация – 4, помощно-технически персонал – 10, 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 1 079 959 лв. (в т.ч. компютри – 59 969 лв., програмни продукти – 14 144 лв., машини и съоръжения – 1 003 084 лв., стопански инвентар – 2 762 лв.) и материални запаси на стойност 5 390 лв.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ЗВЕНТОТО.

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 научно-изследователски, научно-приложен и иновационен център в България и Югоизточна Европа в областта на катализа. В ИК се извършват фундаментални и приложни изследвания в областта на хетерогенния, хомогенния и фотокатализ, химичната кинетика, химичната стабилизация и специфичните изследователски методи, приложими в катализа, както и се подготвят специализирани кадри 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, европейските и световните изисквания за организация на научни изследвания, за осигуряване и поддържане на високо равнище на науката по отношение интердисциплинарност на изследванията, международна конкурентоспособност и национално самочувствие.

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

В ИК се разработват каталитични материали с регулирана структура и свойства за използване в процесите за опазване на околната среда и подобряване качеството на живота, получаване на алтернативни горива (водород), оползотворяване на нови енергийни източници и др. За изследване на получените нови каталитични 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:

- **Катализ за енергия и опазване на околната среда**
 - Научни основи за синтез и подбор на хетерогенни катализатори;
 - Нанесени метални катализатори;
 - Синтез и активност на метало-оксидни катализатори;
 - Порести материали.
- **Дизайн и охарактеризиране на каталитични материали**
 - Синтез и структура на катализатори и сорбенти;
 - Анализ на повърхности;
 - Център по ЕПР спектроскопия;
 - Оползотворяване на отработени каталитични материали.
- **Фотокатализ и фотохромни съединения“.**
 - Фотокатализ;
 - Фотохромни съединения в катализа;

- Теоретични и квантовохимични изследвания в катализа.

Основните научно-изследователски приоритети и направления в ИК са в тясна връзка с основните приоритети на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 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 са пряко свързани с актуализирания през 2021 г. научно-изследователски план, 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 обединява десет научно-изследователски проекта, резултатите от които са представени по-долу.

- По проект **„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, са изследвани свойствата на предварително обработени в H_2 биметални каталитични системи $(10\% \text{ Co} + 0.5\% \text{ Pd})/\text{Al}_2\text{O}_3(\text{TiO}_2)$ в хидрогенирането на СО при атмосферно налягане и налягане 10 атм. Сравнението на активността и селективността при атмосферно и високо налягане на Co-Pd катализатори показва, че съотношението CH_4/CO_2 определено в изпитания при атмосферно налягане, може да служи като най-общ указател за селективността на катализатора към C_{2+} въглеводороди при високо налягане.
- Във връзка с изпълнение на рамковия договор **„Техкерамик М“ АД, Мездра**, Институтът по катализ периодично оказва съдействие при контрола на фазовия състав на материали, влагани в производството и крайните продукти чрез използване на физични методи за анализ.
- В резултат на проведените изследвания по договор с израелската фирма GenCell Ltd **„Аноди на алкални електролитни клетки на база неблагородни метали“** бяха оптимизирани условията за предварителна редукция на неблагороден аноден катализатор за алкални електролитни клетки на основата на никел с добавки от преходни метали. Разработена беше технология за редукция на партида от 300 г катализатор в полупромишлена инсталация, специално конструирана от фирма PID. Извършено беше преминаване към полупромишлен синтез на партида от 400 г катализатор чрез използване на лабораторен миксер, заменящ ръчното импрегниране, като достигнатата активност е напълно идентична с тази на неплатинов катализатор. В края на годината бяха синтезирани 2 кг катализатор, необходими за тестването на неговата продължителност на работа в модулна система, което е етап от преминаване в реални условия на работа – генератор.
- По договор: **„Разработване на нискотемпературен катоден катализатор за зелен амонячен продукт на фирмата GenCell“** беше извършен скрининг на различни катализаторни конфигурации с цел определяне на състава на катоден катализатор за електрохимичен синтез на амоняк при температури до 70°C , в силно алкална среда на 6.6 М КОН и разлагане на вода като източник на водород.
- В резултат на проведените изследвания по проект с Румънската академия по програмата ЕБР **„Смесени оксиди с подобрен състав като носители на наноразмерни метални катализатори“** са синтезирани злато-съдържащи катализатори, нанесени на NiAl слоести двойни хидроксиди и мезопорест TiO_2 , модифицирани с 1, 3 и 5 т.% CeO_2 . Каталитичните

тестове в реакцията на конверсия на въглероден оксид с водна пара (КВОВП) показват, че чрез модифициране с 3 т.% CeO_2 е постигнато образуване на финодисперсни метални златни частици в отработения NiAl катализатор, водещо до високата му активност и стабилност при нискотемпературна конверсия. Обещаващи резултати, от около 90 % конверсия на CO при 180 °C са получени и за съдържащите TiO_2 катализатори.

- По проекта с ФНИ **“Каталитични приложения на зеолити, синтезирани от въглищна пепел”** е синтезиран зеолит X от въглищна пепел от изгаряне на въглища в ТЕЦ „Бобов дол“. За сравнение е синтезиран и образец зеолит X от чисти химикали, върху който е нанесен 4.5 т.% желязо – количество, което се съдържа в образца синтезиран от въглищна пепел. С цел получаване на катализатори за окисление на летливи органични вещества, върху двата зеолита е нанесена 0.2 т.% платина и образците са изследвани в окисление на бензен. По-висока активност проявява катализаторът, създаден на базата на въглищна пепел, което се свързва с по-добрата редуцируемост на този образец.
- В резултат на съвместни изследвания по програмата ЕБР по проект с Институт по макромолекулярна химия в гр. Яш, Румъния, **“Зеолит-полиимидни хибридни материали със зададени свойства”** са синтезирани материали, които са изследвани като инхибитори на горенето. Синтезът включва инкорпорирането на зеолити (синтезирани от групата в България) в полимери на базата на поливинил алкохол (PVA) (получени от групата в Румъния). Изследвано е влиянието на структурата както на зеолитите, така и на полимерната матрица върху характеристиките на хибридните материали. Определена е връзката между структурата и свойствата на материалите, оптимизирани са някои от методите за синтез на полимерите и са разработени нови методи за модификация на зеолитите и дизайн на новите материали с предварително зададени свойства. Изследвани са различни полимерни нанокомпозити с високоефективни свойства, разработени на основата на поливинилов алкохол като основна полимерна съставка. Пригответи са различни видове инхибитори на горенето, съдържащи фосфор в структурата си и е използвана ПВА матрица за получаване на усъвършенствани екологични композити с подобро поведение при реакции на огън.
- По проект **„Устойчиви катализатори на базата на зеолити за окислителни реакции“**, на програмата Двустранно сътрудничество с Индия на ФНИ, са синтезирани серия от морденитни кристали с буферен разтвор от флуороводородна киселина и амониев флуорид с цел да се получат образци с вторична поръзност. Чрез нанасяне на метали и метални оксиди върху така пригответените морденитни образци са получени катализатори за окисление на въглероден оксид и летливи органични съединения.
- По проект „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“-Е+, Институтът по катализ участва в Компонент 2 „Електрически превозни средства и водородна мобилност“ и Компонент 3 „Ефективни методи за улавяне и оползотворяване на CO_2 “.
- В рамките на Компонент 2 е разработен метод на нискотемпературен (90 °C) мокър синтез с хидразин в среда на етиленгликол на Ni/BCY15 аноден катализатор. Методът е нов за областта на протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки, осигурява запазване структурата на матрицата BCY15, води до по-добре диспергиран метален никел и по-силно взаимодействие $\text{Ni}^0\text{-Ce}^{3+}$ в сравнение със синтеза във водна среда. Металната никелова фаза е по-стабилна по време на реокисление в сравнение с промишлен никелов катализатор, получен чрез процедура на механично смесване при висока температура (1100-1400 °C). Във връзка с работата по Компонент 3: се изпълняват следните задачи: 1. Реформинг на метан с CO_2 (сух реформинг на метан); 2. Пречистване на водород посредством процесите на конверсия на CO с водна пара и селективно окисление на остатъчния CO в богата на водород среда. 3. Улавяне на CO_2 . В рамките на първата задача са изследвани Ni и PdNi катализатори, нанесени върху хидроталкити. Изучена е морфологията на отложени въглеродни образувания на повърхността на отработени Ni-съдържащи хидроталкитни (НТ), дисперсността и електронното състояние на отделните компоненти в състава на отработени монометални и биметални PdNi.

Установено е, че Ni катализатор, нанесен върху Mg-Al HT, показва най-висока активност, което е отдадено на високата достъпност на реакционните молекули до активните метални частици. По втората задача са изследвани злато-съдържащи образци, нанесени върху модифицирани с CeO_2 Ni-Al слоести двойни хидроксиди (LDHs) с молно съотношение $\text{Ni}^{2+}/\text{Al}^{3+} = 2.5/1$. Определено е оптималното съдържание на CeO_2 , което благоприятства формирането на златни частици с най-висока дисперсност, което е й причина за високата активност и стабилност на този катализатор в реакцията на конверсия на CO с водна пара (КВОВП). Проведено е сравнително изследване на ролята на промотиращите добавки (Au, Re и Cu) на Ni-Al слоести двойни хидроксиди върху каталитичното им поведение. Синтезирани са монометални сребърни и Ag-Ce катализатори нанесени на различни носители (Al_2O_3 , SiO_2 , ZSM-5 ($\text{Si}:\text{Al}=100$)) и е изучено каталитичното им поведение в реакцията на селективно окисление на CO в богати на водород смеси.

- По проект от програмата за Двустранно научно сътрудничество с Институт по геотехника на Словашката Академия Науките, **“Изучаване на локалната структура на легирани/нанокристални смесени оксиди чрез подходящи физико-химични методи. Образователен подход.”** бяха синтезирани механохимично нов клас комплексни смесени оксиди, високо-ентропийни оксиди със състав: $(\text{Zn}_{0.25}\text{Cu}_{0.25}\text{Mg}_{0.25}\text{Co}_{0.25})\text{Al}_2\text{O}_4$, както и литий производни $\text{Li}_{0.5}(\text{Zn}_{0.25}\text{Cu}_{0.25}\text{Mg}_{0.25}\text{Co}_{0.25})_{0.5}\text{Al}_2\text{O}_{3.5}\text{F}_{0.5}$ и $\text{Li}_{0.5}(\text{Zn}_{0.25}\text{Cu}_{0.25}\text{Mg}_{0.25}\text{Co}_{0.25})_{0.5}\text{Al}_2\text{O}_{3.5}\text{Cl}_{0.5}$. Добавянето на F и Cl в НЕОs е с цел да се повиши образуването на кислородни дефекти. За получаване на информация за микроструктурните параметри получените нови съединения бяха изследвани с помощта на рентгеноструктурен анализ и трансмисионна електронна микроскопия с висока разделителна способност. Изследвани бяха и свойствата на зарядния капацитет на синтезираните проби. Изследването предоставя концепцията за едноетапен синтез на НЕОs от шпинел с многокомпонентен състав. Рентгеновата фотоелектронна спектроскопия потвърди наличието на смесеновалентни двойки $\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+}$ и $\text{Cu}^{1+}/\text{Cu}^{2+}$, както и наличието на кислородни дефекти, чиято концентрация нараства с добавянето на F и Cl към НЕОs, което е предпоставка за постигане на висока каталитична активност.

В Задача 2. Приложение на квантовохимични методи в катализа са включени два проекта.

- По проекта с Института по физикохимия на Румънската академия, **„Експериментални и изчислителни изследвания на адсорбирани фотопревключващи молекули“**, с помощта на динамични симулации посредством програмния пакет LAMMPS(MEAM) бяха изследвани системи от MgH_2 наночастици ($\alpha\text{-MgH}$ и $\gamma\text{-MgH}_2$) във водородна среда за фазовите им трансформации, морфология, пермеабилитет и адсорбция/десорбция на H_2 до нов кубичен MgH_2 в температурната област от 10 - 950 K и налягания от 0.001- 10 GPa. Уточнени бяха термодинамичните параметри и фазовите превръщания в реакцията $\text{Mg} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{MgH}_2$, като водородът е третиран като реален газ. Методите използвани за пресмятане на свойствата на магнезиеви хидриди и термодинамичните им параметри бяха обобщени заедно с разработените наскоро термодинамични подходи, базирани на пресмятания с теорията на функционала на плътността в глава от книга. По втората задача на проекта бяха направени предварителни пресмятания на основното и възбуденото състояние на синтезираното ново съединението 1-(4-сулфобутил)-3,3-диметил-5'-(хидрокси)-2,3'-нафт(2,1-б)(1,4)оксазин от групата на спирооксазините по метода на теория на функционала на плътността и бяха определени структурата и физичните му свойства във вакуум. Пресметнати са основното и възбуденото състояния в обкръжение от водни молекули (първа координационна сфера). Получените резултати показват, че във водно обкръжение възбуденото състояние е по-стабилно от основното. С този подход на компютърни симулации на нови фотохромни съединения ще бъдат характеризирани свойствата им паралелно с експерименталните изследвания (базирани на метода проба-грешка) с цел прогнозирането на междинни структури с предварително зададени свойства.

- По проект „Теоретично изследване на ролята на дифузията за предизвикване на размерни ефекти в нанокаталитични системи и други шумово-индуцирани явления“, 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 е, че традиционната термодинамика води до абсурд, преодоляването на който с помощта на принципа на boundedness води до съществуването на кинетичен праг, под който всяка малка система работи нестабилно. Преодоляването на този праг е по пътя на използване на нови материали. На базата на доказаната от Мария К. Колева decomposition theorem е доказано, че последната покрива много широк спектър от поведения на сравнително къси последователности: от фрактално-подобно, през случайни последователности до почти периодично. Това разнообразие се дължи на нетривиалното взаимодействие между разделителната способност на всяка апаратура и операцията coarse-graining. От друга страна асимптотично, т.е. за достатъчно дълги последователности поведението, следва предписаното от decomposition theorem.

Направление 2 от научно изследователския план за 2021 г. „Разработване на каталитични процеси и нови ефективни наноразмерни катализатори за получаване на чиста енергия и горива“ включва две задачи в научните изследвания.

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

- По проект “Получаване на алтернативни горива от възобновяеми въглерод-съдържащи суровини” по междуакадемично сътрудничество с Испания са разработени високо активни и стабилни никел-съдържащи катализатори за реформинг на метан с въглероден диоксид, независимо от наличието на отложени въглеродни филаменти по време на реакцията. При изследване на физикохимичните свойства на отработени катализатори е намерена корелация между резултатите, получени с помощта на раманова спектроскопия и трансмисионна електронна микроскопия. Определяйки разстоянието между отделните въглеродни слоеве на филаментите е установено наличието на въглеродни образувания както с подредена структура от вида на графит, така и с неподредена структура, върху които са разположени активните метални частици, достъпни за реакционните молекули.
- По проект „Дизайн и приложение на метало-оксидни системи” са изследвани съутаени NiAl слоести двойни хидроксиди (СДХ), модифицирани с магнезий и CeO_2 като катализатори и носители на златни катализатори за реакцията на конверсия на въглероден оксид с водна пара (КВОВП). По-ниската електроотрицателност на Mg в сравнение с тази на Ni осигурява по-висока стабилност на слоестата структура и затруднява формирането на каталитично активни Ni^{2+} и Ni^{3+} центрове при по-ниска реакционна температура. Разработеният подход за въвеждане на CeO_2 позволява запазване на NiAl структура и получаване на добре кристализирала фаза от CeO_2 без етап на налягане. Чрез модифициране с 3 т.% CeO_2 са получени финодисперсни метални златни частици в отработения NiAl катализатор, водещо до високата му активност и стабилност при нискотемпературна КВОВП.

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

- В резултат на проведените изследвания по проект с Полската академия на науките “Разработване и охарактеризиране на нови активни и рентабилни катализатори за получаване на чист водород” беше намерено обяснение за влиянието на метода на синтез (импрегниране или механохимично смесване) на смесени оксиди $\text{CeO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ (30 т.%)

CeO₂) върху активността в реакцията на конверсия на CO с водна пара на нанесени медни катализатори чрез охарактеризиране с комплекс от физико-химични методи. Изучена е и ролята на итриевите йони за повишаване подвижността на кислорода от цериевооксидната решетка. Принос в изясняване на връзката между електронната структура и активността има изследването с рентгенова фотоелектронна спектроскопия. Анализът на окислителното състояние и повърхностната концентрация на всички елементи, включени в състава на тестваните образци показва, че при импрегнирането на Al₂O₃ се формира повърхностна цериевооксидна фаза, обогатена с медни и итриеви йони. Механохимичното смесване води до неравномерно разпределение на CeO₂ и наличие на свободни зони от Al₂O₃, където е локализирана отделна фаза от Y₂O₃ без близък контакт с CeO₂. Тази фаза оказва положително влияние върху поведението на медните катализатори, тъй като намалява неблагоприятното влияние от заместването на Ce³⁺ (лесно участващ в редокс прехода Ce³⁺ ↔ Ce⁴⁺) с Y³⁺ йон, който има постоянна валентност.

- Въз основа на три-компонентната KCoRe конфигурация, която беше намерена като най-активен и стабилен катализатор за КВОВП в сярo-съдържащи газове, по проект **„Волфрам-, молибден-, рений- съдържащи катализатори за получаване на водород от сярoсъдържащи газове: синтез, модифициране и каталитични свойства“**, бяха синтезирани образци CoRe и KCoRe с цел изследване тяхната активност в класическия процес на КВОВП. Синтезирани бяха и CoReMo и KCoReMo системите, при които скъпият рений, един от най-редките елементи в земната кора, е наполовина заместен от достъпния молибден. Анализирани бяха текстурните и редукиционни характеристики на образците. В процес са каталитични тестове с използване на реакционната газова смес, като подход за предварителна редукиция.
- 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, е анализирано чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия 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 чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия. Установено е, че златото е в метално състояние (BE 84.4-84.7 eV) и запазва високодисперсното 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.

Направление 3 от научно-изследователския план за 2021 г. **“Нови каталитични материали и процеси за подобряване качеството на живот”** обединява две задачи в научните изследвания:

Задача 1. Нови катализатори и устойчиви технологии за здравословни храни, чиста индустрия и транспорт.

- Проведени са сравнителни физикохимични и микробиологични изследвания на замърсяването с фини прахови частици (ФПЧ) на въздуха в град София в периоди на интензивен трафик и в периоди на намален трафик, както и при налагането на карантина поради КОВИД-19 пандемията по проект с ФНИ **„Комплексно изследване на фини прахови частици в атмосферата чрез лидарно локализиране на време-пространственото им разпределение, характеризирание по състав, структура, морфология и микробно съдържание.**

Физикохимичното характеризиране на събраните и селектирани по размери фини прахови частици (ФПЧ) показва високата хетерогенност и комплексност на материалите, както и различния характер на източниците на замърсяване на въздуха през изследваните периоди. Микробиологичните анализи проследиха бионатоварването на аерозолните ФПЧ с различно количество бактерии и гъби. Създадена е методология за систематично изследване на ФПЧ. Детайлна информация за изследваните ФПЧ е получена въз основа на Мьосбауеровия анализ, прахова рентгенова дифракция, електронна микроскопия с елементарен анализ и фотоелектронна спектроскопия (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. 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 и през същите периоди.

- Дейности по проекта **„Механохимия за устойчива индустрия“, COST Акция CA 18112, Mechanochemistry for Sustainable Industry, АКРОНИМ: Mech@SustInd,** включват провеждане на експерименти по механохимичен за синтез на нови катализатори с две основни приложения - за синтез на активни фармацевтични съставки и за получаване на чиста енергия. Получените материали са охарактеризирани от екипа на ИК-БАН и са изпратени за провеждане на каталитични тестове от други екипи. Установените сътрудничества и стартираните съвместни изследвания с участващите научни и технологични екипи от различните страни-участнички са с цел решаване на конкретни иновативни задачи за използване на широките възможности на механохимията при разработването на активни катализатори за фармацевтичната индустрия и транспорта. Участието на представител на страната и ИК в ръководството на COST акцията като ръководител на стандартизационните дейности, допринесе за повишаване на иновативна готовност на изследванията по проекта с предварителното въвеждане на стандартизационни процедури на експериментите. Проектът е добър пример за силни български позиции в COST акция с участие в ръководството му и с пряката ангажираност с планирането на задачи и с оценка на кандидатурите на кандидатстващи нови участници в проекта.
- По проект **„Механохимия за устойчива индустрия“, Договор КП-06-КОСТ/18 от 2019, съфинансиране по COST акция CA 18112, 2019-2021.**, през годината бяха проведени серии от изследвания на ролята на различните параметри на механохимична обработка при получаването на наноразмерни желязосъдържащи катализатори 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 кристалохимичният състав, структурата, както и дисперсността на образците. Стартирани са съвместни изследвания за получаване и характеризиране на наноразмерни метални частици покрити с тънък слой от графен.
- Работата по проекта **„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,** включваше подготовката на иновационната готовност на трите продукта, заложи 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 сътрудничество с другите участващи научни и технологични екипи от страните участнички в проекта. Представителят от 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. Проведени са организационни дейности за планиране на училище по проекта: 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 виртуално събитие.

- Проектът **„Химия на металите от групата на платината“**, Horizon 2020, Marie Skłodowska-Curie Research and Innovation Staff Exchange: Chemistry of Platinum Group Metals, АКРОНИМ: CHemPGM, 2020-2025 стартира успешно, въпреки отлагането му с половин година поради пандемията от КОВИД-19. Изпълнението на работните задачи и осъществяване на планираните командировки е силно затруднено. Екипът от ИК активно се включи в провежданите уеб-базирани срещи по проекта, които замениха присъствените мероприятия в условията на пандемията от КОВИД-19. .
- По проект със Сръбската академия на науките и изкуствата **„Зелен синтез на нови каталитични материали за опазване на околната среда“**, бяха проведени серии експерименти за получаване на нови и оптимизирани каталитични материали чрез устойчиви методи за синтез - зелената химия и механохимия. Осъществен е механохимичен синтез на каталитични материали с перовскитова структура ($\text{LaTi}_{0.4}\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3$) и химичен състав, включващ различно съотношение на Mg и Fe. Физикохимичните характеристики на така получените материали бяха сравнени с характеристиките на образци със същия състав, но синтезирани по конвенционален керамичен метод. Установени са зависимости при получаването на образците с различен състав и дисперсност, в зависимост от използваните условия на механохимичната и термичната обработка на материалите. Материали са тествани в моделни реакции за очистване на отпадни води, замърсени с багрила от текстилната промишленост. Проведени са сравнителни анализи в тест-реакциите на разлагане на багрилата метил оранж и метиленово синьо.
- По проект **„Иновативен подход в дизайна на катализатори за частично хидрогениране на растителни масла“** с Белградския университет, Институт по химия, технология и металургия, беше приложен нов подход за разработване на активен и/или селективен никелов катализатор за частично хидрогениране на растителни масла. Той беше използван за модифициране на силициевите носители, природен диатомит и промишлен силикагел тип С с CeO_2 за стабилизиране на металното състояние на никела. При охарактеризирането на повърхностното електронно състояние на модифицираните силициеви носители беше установено наличие на Ce^{3+} дефекти, вследствие на отклонение от стехиометрията и структурата на нанесеният CeO_2 , които не се регистрират в катализаторните прекурсори поради покриването от голямото количество никел. Модифицирането на силициевите носители с CeO_2 оказва влияние на редукционното поведение на никеловите катализатори като измества редукционния максимум с 30 °C към по-ниските температури. Това се дължи на невъзможността да се образува здрава Ni-O-Si връзка в Ni-филосиликатната структура, повлияно от образуване на Ce-O-Si връзки.

Задача 2. Приложна и фундаментална ЕПР спектроскопия

- По проект **„ЕПР дозиметрия“** с ЕПР спектроскопия са изследвани облъчени с гама лъчи с дози от 0.5 до 20 kGy таурин, цистеин и аскорбинова киселин за определяне на дозиметричните им свойства. Преди облъчване всички вещества са неактивни, а след облъчване имат характерни ЕПР спектри. Определени са параметрите на ЕПР спектъра и оптималните стойности на апаратурните параметри. Намерени са интервалите от дози, в които могат да се използват. Резултатите са сравнени с дозиметричните характеристики на захароза. Направен е опит да се подобри чувствителността на захароза като дозиметричен материал за високоенергетично лъчение. За тази цел са изследвани смеси на захароза с аскорбати и цистеин. Резултатите показват намаляване на отклика на захароза, което е индикация, че те са подходящи в по-голяма степен за радиопротектори отколкото за дозиметри.
- По проект **„ЕПР анализ на хранителни продукти“** е изследван ефекта от гама облъчване с дози 1, 5 и 10 kGy върху антирадикаловата активност на лиофилизирано пчелно млечице

посредством метода на Електронния Парамагнитен Резонанс. За целта е използван стабилен свободен радикал 1,1-дифенил-2-пикрилхидразил (DPPH). Определен е ефектът на разтворителя при контролните проби, които се вземат предвид за отчитане на разреждането. Изчислени са количествата уловени DPPH радикали от екстракта на пчелно млечице с различни концентрации. Резултатите показват, че при пробите облъчени с 5 и 10 kGy се наблюдава слабо намаляване на антирадикаловата активност, докато при 1 kGy тя не се променя.

- По проект „ЕПР в катализа“ с помощта на ЕПР спектроскопия са охарактеризирани каталитични материали с цел определяне на окислителното състояние на металните йони в тях, взаимодействието им с обкръжаващата ги среда и за установяване на наличието на кислородни радикали. Регистрирани са спектри при различни температури в диапазона от 295 K до 123 K. Изследвани са проби съдържащи Cu, Ce, Fe, Mn, Zr и др., нанесени върху различни носители и тествани в каталитични реакции.
- Задачата по проекта **“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, се състои в изследване на кинетиката на затихване на радиационно индуцираните свободни радикали в облъчени бадеми и орехи. След облъчване в тях се регистрира т. нар. „целулозоподобен“ ЕПР спектър, състоящ се от една централна и две сателитни линии. Пробите са изследвани за период от 180 дни след облъчване с две различни дози. Кинетичното изследване показва, че централната линия намалява с около 90 % при бадеми и 80 % при орехи, докато сателитните линии остават относително стабилни. Не се наблюдава значителна разлика в поведението на ядките, облъчени с 10 и 25 kGy. ЕПР спектроскопията може да се използва за идентифициране на гама облъчване при орехи и бадеми дори шест месеца след радиационно третиране.
- По проект **„Разработване и усъвършенстване на нови подходи за качествена и количествена оценка на радиационно третиране на базата на ЕПР спектроскопия“**, с ФНИ, са изследвани с ЕПР спектроскопия смеси на захароза с аскорбинова киселина, натриев аскорбат, цистеин и дифениламин в различни съотношения. Използвани са различни количества от веществата - 2, 5, 30 и 50 %. Регистрирани са ЕПР спектрите на избраните вещества и техните смеси. Определени са оптималните стойности на инструменталните параметри и дозовия отклик. Сравнени са резултатите от получените смеси с тези за захароза. Определено е приложението на новополучените системи захароза/аскорбинова киселина (натриев аскорбат, цистеин и дифениламин) при изследване с ЕПР спектроскопия. Изучено е влиянието на различни дози йонизиращо лъчение върху радикал улавящата и антиоксидантната способност на дозиметрите, съдържащи аскорбати, аскорбинова киселина и цистеин, което от своя страна може да повлияе върху чувствителността им. Изследван е ефекта на гама-стерилизация с дози от 1, 5 и 10 kGy върху проби от лиофилизирано пчелно млечице. При необлъчени проби бяха регистрирани ЕПР спектри, които са характерни за комплекси на мед (II). След облъчване в допълнение се регистрира тясна синглетна линия. Тя се дължи на генерирани в следствие гама-стерилизация кислород-центрирани свободни радикали. От изследваната зависимост на стабилността на индуцираните свободни радикали с времето след облъчване следва, че кинетичните криви за 5 и 10 kGy са почти идентични. Отчетлива разлика има при 1 kGy. Идентифициране на гама-стерилизация при пчелно млечице е възможно до 5 месеца след облъчване.

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

- По проекта от програмата Двустранно сътрудничество с Русия, ФНИ „Синтез и изследване на молекулни и супрамолекулни устройства на основата на спиронафтоксазини, хромени и стирилови багрила“ е синтезиран, охарактеризиран и изследван супрамолекулен комплекс на бензопиран, съдържащ бензо-18-краун-6-етер и 4-аминонафталимид като флуорофор. В резултат на проведените изследвания е установено взаимното влияние на фотохромните и флуорофорните звена върху свойствата на получената супрамолекулна система. Получени са полупродукти за синтез на серия фотохромни съединения от спирооксазинов тип. Синтезирано е ново фотохромно съединение от спиронафтоксазинов тип, съдържащо сулфобутилов заместител в индолиновата част на молекулата и подходящо разположен ОН заместител в нафтоксазиновата част за участие в процеси на комплексообразуване с йони на преходни метали. Получени са хлоро- и бромозаместени бензо[d]оксазол-2(3H)-он производни чрез нов, зелен, енергийно ефективен метод, използвайки евтин търговски достъпен комплекс урея-водороден пероксид (UHP) и солна или бромоводородна киселина с отлични добиви (87-98%), като е редуцирано времето за синтез от 10 часа на 1 час. При окислителното халогениране основен страничен продукт е водата, което прави метода ценен от гледна точка на „зелената химия“.
- По проект „Синтез, свойства и изследване на функционални багрила“ е синтезирано и охарактеризирано с ЯМР (¹H и ¹³C спектри) и мас спектроскопия ново флуорогенно монометин цианиново багрило за нековалентно маркиране на ДНК. Получени са нови полупродукти за синтез на нови стирилови багрила за приложение за интеркалиране с нуклеинови киселини.

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

- При изпълнение на проект „Възобновяема интегрирана система за елиминиране на органични замърсители от води и въздух“ с ФНИ са синтезирани Cu-Ni-Fe оксидно-нитридни материали чрез метода на самовъзпламеняване. Използвано е молно съотношение Cu:Ni:Fe=0.5:0.5:2, а рН на разтвора е коригиран до 4, 6 и 8 при синтеза на различните образци. В образците са идентифицирани оксидна фаза с шпинелна структура, нитридна фаза от вида Fe_{4-x}Ni_xN и следи от CuO. Наличието на дублети с високо квадруполно разцепване в мьосбауеровите спектри при стайна температура и тяхното запазване при температура на течен азот е показателно, че нитридната фаза е с високо съдържание на никел. Синтезираните Cu-Ni-Fe оксидно-нитридни материали показват добра каталитична активност в реакцията на разлагане на метанол и селективност към H₂ и CO. От проведените тестове на образците за фотокаталитично окисление на ализарин при видима и UV-C светлина (254 nm) е установено, че образецът синтезиран при рН 8 притежава най-висока активност.
- По проект „Се модифицирани порести оксиди като катализатори за окислителни реакции. Ефект на носителя върху каталитичната активност“ по програмата за междуакадемично сътрудничество с Румънската академия са синтезирани образци с 5% Ti, като титанът е внесен в синтезния гел. Получените материали са модифицирани с Се и Pt, като процентът Pt варира в интервала 0.25-1%. В реакцията на окисление на пропан модифицирането с Се намалява активността на катализатора. Изследванията с инфрачервена спектроскопия дават основание да се предположи, че реакцията на окисление на CO при температури до 250°C протича по механизъм на Ленгмюир-Хиншелууд, като повърхностните видове, участващи в процеса зависят от последователността на внасяне на Pt и Се.
- По проект „Функционални композитни наноматериали, получени от природни източници, за опазване на околната среда“, ФНИ, в което ИК е съизпълнител, са синтезирани композитни материали на основата носител от клиноптилолит, модифициран със

сребърни йони. Същите са тествани във връзка с тяхната антибактериална активност и по-специално ефективността им спрямо бактерията Ешерихия Коли. Охарактеризирането на тези материали с рентгенова фотоелектронна спектроскопия показва наличието както на Ag^+ йони на повърхността, така и на наноразмерни клъстери от метално сребро. Рентгеновото облъчване по време на анализа във вакуум води до редуциране на сребърни йони до метално сребро.

- По проект „**Фотокатализ и УОП**“ беше приложен иновативен подход за последователно планиране на броя експерименти, базиран на ортогонални подредби на матрицата на Тагучи за вариране на стойностите на параметрите на вход във фотокаталитичния реактор – както фотореактор за очистване на замърсени води, така и фотореактора за очистване на замърсен въздух. Чрез този подход се намалява значително броя на опитите в сравнение с пълен факторен експеримент, което спестява време и разход за химикали-реагенти. Приложен беше и корелационният анализ на Грей за статистическа обработка на данните и извеждане на статистически математичен модел за определяне на регресионните коефициенти показващи влиянието на входните параметри върху функцията на отклика – степента на превръщане на замърсителя.
- По проект с Институт по основи на химичните процеси на Чешката академия „**Нови методи за синтез на твърди катализатори за промишлени реакции от значение за околната среда**“ е синтезиран мезопорест алуминиев оксид чрез два метода, от разтвор - зол гел технология и хидротермален метод. Нанесените двуметални и триметални катализатори, синтезирани чрез едновременно импрегниране на никелови, молибденови и волфрамови соли са тествани в реакциите на хидродесулфиране на тιοфен и 4,6-диметил-добензотиофен. Най-висока каталитична активност е измерена за триметалния NiMoW катализатор нанесен на Al_2O_3 синтезиран чрез хидротермален метод. Степените на конверсия са 66 % в реакцията хидродесулфуриране на тιοфен при 340 °C и 99.5 % в реакцията хидродесулфуриране на 4,6-диметил-добензотиофен при 360 °C и налягане 5MPa.
- По проект **съфинансиран по COST Акция СА 17136 „Нови каталитични материали за очистване на замърсители на въздуха“**, е оптимизиран съставът на смесени оксиди Co_3O_4 - CeO_2 за окисление на бензен чрез прилагане на лесно изпълним и екологичен подход на механохимично смесване. Установено е, че материалът със състав 70 т.% Co_3O_4 -30 т.% CeO_2 проявява най-висока активност, като се достига 100% окисление на бензен при 200 °C, която е сравнително ниска температура за каталитичен материал, несъдържащ благороден метал. Резултатите от теста за стабилност при 200 °C в продължение на 24 часа при запазена 100% конверсия на бензен без странични продукти на непълно окисление прави този катализатор перспективен и икономически изгоден, отчитайки както предимствата на механохимичното получаване, така и по-ниските енергийни разходи за изгаряне на летливи въглеводородни замърсители на околната среда. Обещаващи резултати са получени при изследване на злато-съдържащи катализатори, нанесени на смесени оксиди Co_3O_4 - CeO_2 и Co_3O_4 - $\text{CeO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ в реакцията на окислението на формалдехид. Измерената 95 % степен на окисление при стайна температура и 100 % при 40 °C върху катализатор, за който е използван икономически порентабилен носител със състав 50 т.% Al_2O_3 -50 т.% смесен Co_3O_4 - CeO_2 е резултат със значим потенциал в разработването на ефективни и конкурентноспособни каталитични материали за очистване на въздуха в затворени помещения.
- През 2021 година продължи участието в онлайн заседания на Управителния съвет на COST Акция СА 17136 „**Мрежа за качество на въздуха в затворени помещения**“. Изготвен е окончателният доклад на работна група 3b, включващ таблици с характеристики 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). Принос към изпълнението на целите на работна група 5 е предоставянето на информация за законодателството в България, касаещо качеството на въздуха в затворени помещения.

- По проект **„Подобрени композитни фотокатализатори за разграждане на органични замърсители във вода, активиращи се чрез УВ-светлина на основата на TiO_2 и графенов оксид с нанесени благородни метали“**, част от Национална програма за „Млади учени и постдокторанти“ бяха проведени изследвания свързани с фотокаталитични тестове за разграждане на адипинова киселина, при различни концентрации на замърсителя във воден разтвор с катализатори, съдържащи паладий и злато под формата на наноразмерни клъстери върху титанов диоксид. Реализирани са изследвания свързани с наноразмерните материали на основата на TiO_2 , протичащи в присъствие на O_2 и смес от O_2/O_3 . Специфичните характеристики на реакцията са изследвани в няколко серии при: различни катализатори (Pd/TiO_2 , Au/TiO_2 и чист TiO_2), УВ-А (365 nm) и УВ-С (254 nm); озон ($7.5 \cdot 10^{-4} \text{ mol/l}$). 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 **„Морденит и ZSM-5 като катализатори в реакции за опазване на околната среда“** от Национална програма за „Млади учени и постдокторанти“ е синтезиран успешно високо кристален зеолит Морденит от изходен гел със следния състав $18\text{SiO}_2:\text{Al}_2\text{O}_3:1.24\text{K}_2\text{O}:1.21\text{Na}_2\text{O}:280\text{H}_2\text{O}$ и 5 т. % зародиши (морденитни кристали) при температура на кристализация 180 °C и продължителност 72 часа. Получените кристални продукти са след синтезно модифицирани с буферен разтвор съставен от 0.25 M флуороводородна киселина в комбинация с амониев флуорид при продължителност на обработката 20 мин. Установено е повишаване на специфичната повърхност и подобряване на дифузионните свойства при йерархичните зеолитни структури, като резултат от създадените вторични мезо и макро пори върху зеолитните кристали по време на обработката. Получените изходни и йерархични зеолитни структури са използвани като носители за получаване на катализатори с приложение в реакции на пълно окисление на СО и летливи органични съединения. Чрез метода на мокро импрегниране върху изходен и третиран Морденит са нанесени активни метали (Pt, Cu и Pt/Cu). Установена е фина дисперсност и равномерно разпределение на металните наночастици върху йерархичния зеолитен носител. Чрез физико-химични методи и техники е получена информация за степента на окисление и местоположението на металната фаза, както и за влиянието на химичния състав и йерархичността на зеолитния носител върху структурните характеристики на катализаторите. Наблюдават се по-силни взаимодействия между металната компонента и йерархичния третиран носител в сравнение с изходния аналог. Изследвана е каталитичната активност и селективност на Pt, Cu и Pt/Cu катализатори в реакции на окисление на летливи въглеводороди (пропан и бензен) и въглероден оксид. Наблюдава се подобряване на активността на катализаторите, формирани от киселинно обработен зеолитен носител, което е в резултат от улеснения достъп на реагенти и продукти до активните центрове разположени както по повърхността на катализатора, така и до тези намиращи се в зеолитните канали и кухини.
- По проект **„Оксидни катализатори с носител български природен зеолит за очистване на въздух от вредни емисии“** по програмата млади учени на ФНИ, са синтезирани са високо активни и евтини катализатори за окисление на ЛОС на основата на оксиди на преходните метали от типа (MnOx , Co_3O_4 , $\text{MnOx-Co}_3\text{O}_4$) нанесени върху природен зеолит от типа Клиноптилолит добит от находища в Източните Родопи. С цел изчистване на повърхността и порите на носителя и увеличаване на каталитично активните места, чрез получаване на Н-(водородна) е извършена химична модификация на носителя – киселинно третиране и троен йонообмен. Получените катализатори по метода на импрегниране със съдържание 10% Со, 10% Мп, 20% Со, 20% Мп, а в смесените катализатори концентрациите на оксидите и

съотношението Co/Mn са варирани, като крайното количество оксид е 20 %. Измерена е каталитичната активност на катализаторите в реакция на пълно окисление на хексан и пропан.

- Проведените изследвания по проект от Национална програма за „Млади учени и постдокторанти финансирана от Министерството на образованието и науката **„Оксидни мед-манганови катализатори в реакции за опазване на околната среда“** – по метода импрегниране на носител са синтезирани медни и смесени мед-манганови катализатори в различни съотношения (1:1, 1:2, 2:1). Носителят е български природен зеолит - клиноптилолит. Образците са охарактеризирани с физико-химични методи като рентгенова дифракция, рентгенова фотоелектронна спектроскопия, температурно-програмирана редукция и др. Беше измерена каталитичната им активност в реакция на пълно окисление п-хексан. Високата активност на смесените образци се отдава на присъствието на редокс-двойката $\text{Cu}^{2+} + \text{Mn}^{3+} \leftrightarrow \text{Cu}^{+} + \text{Mn}^{4+}$.
- В резултат на проведените изследвания по проект **„Дизайн на активни и стабилни катализатори за пълно окисление на метан, посредством модифициране на Pd-Al₂O₃ с кобалт и никел. Експериментално и теоретично изследване“** от програмата Двустранно сътрудничество България – РУСИЯ на ФНИ е установено, че внасянето на 0,5 т.% никел е достатъчно за подобряване на каталитичната активност на Pd-Al₂O₃ катализатор. По-нататъшното увеличение на съдържанието на никел не води до подобрене на каталитичната активност.
- По проект с ФНИ **„Катализатори на основата на оксиди на преходни метали, нанесени върху порести материали за пълно окисление на летливи органични съединения (ЛОС) и СО.“** беше проследено влиянието на добавката от церий към Co-SBA-15 и Mn-SBA-15. Установено е, че при използването на т. нар. „метод на двата разтворителя“ се образуват фино дисперсни кобалтови, манганови и цериеви оксиди, които взаимодействат с каналите на молекулното сито SBA-15. Това води до образуване на трудно редуцируеми оксидни фази и следователно по-ниска каталитична активност в сравнение с монокомпонентните Co и Mn катализатори. Мезопорестата структура предотвратява агломерация на оксидните частици, в резултат на което се получава стабилен 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.

Приетата през 2018 година Стратегия за развитие на ИК до 2030 г. е в пълно съответствие с Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017 – 2030, Стратегията за развитие на БАН 2018-2030, настоящето състояние и традициите на ИК-БАН, както и с очакванията за ролята на ИК в съвременното общество. През 2021 година беше актуализиран Научно-изследователският план на ИК и бяха определени нови структурни звена (три лаборатории) на Института.

Тематични направления заложи в работата на научно-изследователските звена на ИК през 2021 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 2021 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).

ИК е партньор в разпределената инфраструктура ИНФРАМАТ, включен в Националната пътна карта. Полученото финансиране през 2021 г. беше използвано за изграждане и оборудване на нова лаборатория, ангажирана с дейността на Мьосбауерова спектроскопия. Закупени бяха елементи и консумативи за дооборудване на наличната в Института апаратура.

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

Институтът по катализ участва в програмата E+ по проект „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“, D01-214/2018. в Компонент 2: Горивни клетки и Компонент 3: Каталитични методи за конверсия на CO₂ и получаване на водород от възобновяеми суровини или отпадъци. През 2021 г. беше разработен нов нискотемпературен синтез на Ni/BCY15 аноден катализатор с хидразин в „зелен разтворител“ етиленгликол. Методът е нов за областта на протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки и осигурява не само запазване структурата на матрицата BCY15, но и по-добре диспергиран метален никел и по-силно взаимодействие Ni⁰-Ce³⁺ в сравнение с получаването му във вода.

Във връзка с работата по работен пакет 3: Каталитични методи за конверсия на CO₂ и получаване на водород от възобновяеми суровини или отпадъци се изпълняват следните задачи:

- Реформинг на метан с CO₂ (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;

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, характеризиране 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 три проекта по програмата COST, свързани с проблемите на опазване на околната среда: „Мрежа за качество на въздуха в затворени помещения“ (Indoor air pollution network), с ръководител проф. д-р Т. Табакова и „Механохимия за устойчива индустрия“ и „Иновативни и устойчиви технологии за намаляване на зависимостта от критичните суровини, използвани в материали с приложение за по-чист транспорт“, с ръководител проф. д-р З. Черкезова-Желева.

В ИК се работи по проект от програмата за междуакадемично сътрудничество с Белградски университет, с ръководител доц. д-р Д. Николова, свързан с дизайн и синтез 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. „Зелен синтез на нови каталитични материали за опазване на околната среда“,

През 2021 г. в ИК са синтезирани:

- катализатори на основата на оксиди на преходни метали, нанесени върху порести материали за пълно окисление на летливи органични съединения (ЛОС) и CO;
- катализатори посредством модифициране на Pd-Al₂O₃ с кобалт и никел за пълно окисление на метан;
- активни и стабилни никел-съдържащи катализатори за реформинг на биогаз;
- катализатори за пълно окисление на CO и летливи органични съединения, в които за носител са използвани йерархични зеолитни структури;
- фотокатализатори за разграждане на органични замърсители във вода, активиращи се чрез UV-светлина на основата на TiO₂ и графенов оксид с нанесени благородни метали;
- смесени оксиди Co₃O₄-CeO₂ за окисление на бензен чрез прилагане на лесно изпълним и екологичен подход на механохимично смесване;
- триметален NiMoW катализатор чрез хидротермален метод нанесен на Al₂O₃ за тестване в реакцията хидродесулфуриране на 4,6-диметил-добензотиофен;
- катализатори, модифицирани с Ce и Pt за окисление на пропан и CO;
- катализатори и носители на златни катализатори съчетаени NiAl слоести двойни хидроксиди (СДХ), модифицирани с магнезий и CeO₂ за реакцията на конверсия на въглероден оксид с водна пара.
- зеолит X от въглищна пепел, с нанесен 0.2 % платина за окисление на летливи органични вещества;

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

Стремежът е да се постигне оптимален баланс между фундаменталните и приложните 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. Научните изследвания, които се провеждат от ученията в ИК са насочени към търсенето на високоефективни екологично чисти технологии и алтернативни горива, чиято употреба не е съпроводена с отделяне на вредни емисии. Колективи от учени работят 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“.

Една от основните политики в ИК е привличане на млади хора за научноизследователска работа, като стремежът е да им се осигурят привлекателни условия за работа, висока квалификация и добро кариерно развитие. През 2021 в Института бяха назначени студенти от ФХФ на СУ „Св. Климент Охридски и ХТМУ, които успешно се включиха в работата по конкретни задачи във връзка с изпълнението на проектите. В ИК е въведена система за диференцирано заплащане на ученията, включваща два компонента: (1) основната работна заплата - с фиксиран размер за отделните научни длъжности и (2) допълнително материално стимулиране (ДМС), обвързано с конкретни научни

результати. Основен принцип при формирането на трудовото възнаграждение в ИК е включване в работната заплата на допълнителна компонента спрямо постигнатите резултати. За това беше отчетена проведената Атестация на получените резултати за тригодишен период на научния и помощния персонал.

През 2021 в ИК беше спечелен един нов проект по НП „Млади учени и постдокторанти“ (млад учен) и успешно завършиха други два проекта от предходната сесия (1 млад учен и 1 постдокторант).

В изпълнение на *Специфична цел 10*, трябва да се постигне значително интензифициране на връзките на науката с образованието, бизнеса, държавните органи и обществото като цяло. Членове на колектива на Института активно популяризират научно-изследователската дейност сред ученици от столичните училища. През 2021 г. на територията на Института бяха провеждани консултации и експериментални дейности, свързани с проекти за участие на различни международни и национални състезания за млади изследователи в областите химия и екология. Използван беше STEM подход на учене и преподаване. Ученици от 91. НЕГ под ръководството на гл. ас. д-р Петя Петрова посещаваха периодично ИК за провеждане на лабораторни експерименти. Те получиха специална награда на регионалния кръг на състезанието „Jugend forscht“ („Младежта изследва“) - Германия.

През 2021 г в ИК се обучаваха студенти по проект „Студентски практики – Фаза 1“ финансиран от ОП НОИР. Студенти изработват курсови и дипломни работи за образователните степени „бакалавър“ и „магистър“. През 2020 г. ИК получи акредитация на докторските програм „Кинетика и катализ“ и Химия на твърдо тяло“ за срок от 6 години. С цел повишаването на видимостта на ИК в обществото, беше разработена стратегия за публична комуникация. Поддържа се актуална интернет страница.

Учени от Института участват като експерти в МОН, постоянни и временни 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 провеждания в ИК са на основата на конкурсно-проектен принцип. Те намират приложение за решаване както на фундаментални проблеми в катализа, така и за решаване на важни иновативни, технологични, екологични и социални проблеми, свързани с неговото приложение. Дейностите извършвани в ИК са пряко свързани с 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.

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

В ИК се провеждат обществено значими научно-приложни изследвания, които имат пряк ефект за обществото. Те включват разработване на методи, катализатори и технологии за:

- Каталитични системи за почистване на отпадъчни газове, замърсени почви и отпадъчни води;
- Получаване на чист водород за горивни клетки;
- Получаване на водород от природни и възобновяеми енергийни суровини;
- Получаване на наноструктурирани материали с мултифункционални свойства;
- Получаване на наноматериали с контролиран дизайн и подобрени каталитични свойства;
- Физикохимични, спектрални и термични анализи;
- Катализатори за висококачествени хидрогенирани масла, намиращи приложение в хранително-вкусовата промишленост;
- Деструкция и стабилизация на органични и високомолекулни съединения;
- Разработване на нови екологически приемливи („зелени“) методи за синтез на нови багрила за ковалентно маркиране на ДНК;

- Супрамолекулярни устройства на основата на фотохромни съединения за акумулиране на слънчева енергия;
- Дозиметри на база твърдо тяло за аварийна и ретроспективна дозиметрия.
- 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 научни организации и университети в България и чужбина, както и с химически фирми 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“, Тракийски Университет - Стара Загора, Русенски университет „Ангел Кънчев“ - клон Разград, ИКХТ - Селскостопанска академия.

В чужбина ИК има сключени рамкови договори с научни 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 Румънската академия, Институт по макромолекулна химия, Румъния, Институт по наноматериали на Полска академия на науките, 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 една фирма в България, „Техкерамик-М“ ООД, Мездра и една международна, „ГенСел“, Петах Тиква, Израел.

1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата

През отчетния период ИК няма пряко регламентирани общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата, които да бъдат отчетени, 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., което е един от първите членове на Европейска федерация на ЕПР дружествата.

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 специализирани кадри в областта на катализа.

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2021 г.

Научната дейност на ИК е изградена на проектен принцип. През 2021 г. беше актуализиран Научно-изследователския план на Института, 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“ и Стратегията за развитие на БАН 2018-2030. В ИК се работи по **3** основни тематични направления. Задачите, които се изпълняват по отделните направления са пряко свързани с изпълнение на проекти, финансирани от Европейски програми, ФНИ, по междуакадемичен обмен или бюджетна субсидия. ИК участва в **3** COST акции: „Механохимия за устойчива индустрия“, „Иновативни и устойчиви технологии за намаляване на зависимостта от критичните суровини, използвани в материали с приложение за по-чист транспорт“, с координатор проф. д-р З. Черкезова-Желева и „Мрежа за качество на въздуха в затворени помещения“ с координатор проф. д-р Т. Табаков, един проект по програма Мария Кюри, Horizon 2020 Research and Innovation Staff Exchange: Chemistry of Platinum Group Metals, АКРОНИМ: CHeMPGM с ръководител проф. д-р З. Черкезова-Желева, **14** проекта, финансирани от ФНИ, **10** проекта по програмата за ЕБР на БАН, **3** проекта от НП „Млади учени и постдокторанти“ и **3** съвместни проекти с фирми, **2** с фирмата „GenCell Ltd“, Израел и **1** с „Техкерамик“ ООД Мездра.

През отчетния период в Института са изпълнявани **7** 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 2021 година са публикувани в **56** научни труда, в това число **41** публикации в реферирани и индексирани от WoS и SCOPUS, като **1** (2 за 2020) публикации са в списания, които оглавяват ранглистата в съответната научна област, **16** научни публикации в издания, които попадат в категория **Q1**, но не оглавяват ранглистата, **15** в категория **Q2**, **5** в категория **Q3** и **3** в категория **Q4**, **1** (3 за 2020) в рецензирани списания, неиндексирани в Scopus, WoS, ERIH+ и **12** научни публикации в рецензирани тематични сборници, издадени от международни академични издателства. Приети за печат в издания, индексирани в WoS, Scopus, ERIH+ са **2** (публикации).

През 2021 година **378** научни трудове на учени от Института са цитирани **1389** (**1385** за 2020) 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.

Вече втора година продължава пандемията от Ковид 19, поради което много от планираните научните форуми бяха отменени или проведени онлайн. Въпреки това през 2021 година учени от ИК са представили **12** доклада на **11** международни научните форуми, като проф. З. Черкезова-Желева е представила един пленарен доклад на 15th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry и един поканен доклад на 9th International Conference on Renewable Electrical Power Sources в Белград, проф. Т. Табакова - един пленарен доклад на XIV Пролетен семинар "Интердисциплинарна химия". Представени са **23** постерни доклада на международни научни форуми.

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.

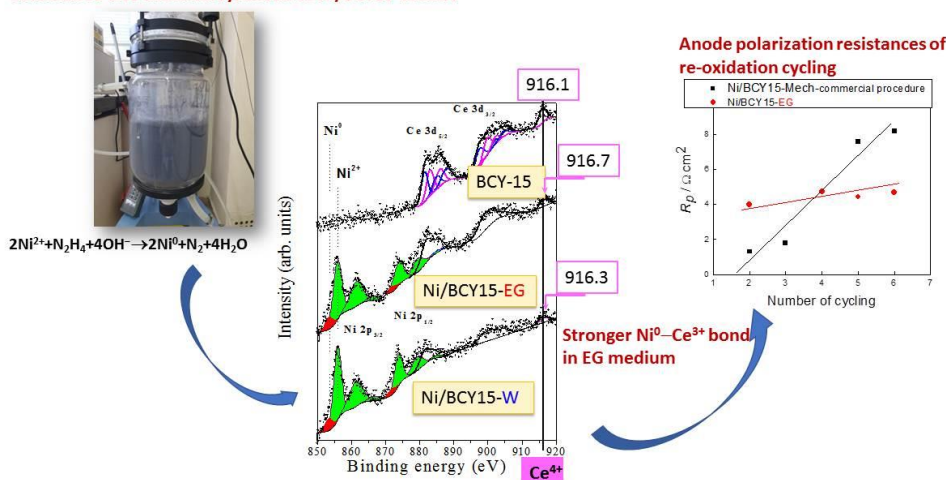
Учени от Института участват в ръководните органи и като членове на научни организации. Проф. д-р Юрий Кълвачев е заместник председател на Хумболтовия съюз в България, Проф. д-р Зара Черкезова-Желева е член на програмния комитет на Европейския научноизследователски съвет по Рамковата програма Хоризонт за Европа, доц. д-р Йорданка Каракирова е член на Временната комисия по Химически науки към ФНИ, а гл. ас. д-р Петя Петрова е експерт към МОН като оценител на учебници по Химия и опазване на околната среда.

2.1. Най-значимо научно постижение на ИК - БАН за 2021 г.

Нов подход за синтез на Ni/BCY15 аноден катализатор чрез мокър химичен синтез с хидразин с приложение в протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки

Ръководител: доц. д-р Димитринка Николова

Alternative wet-chemical synthesis of Ni/BCY15 cermet



Подобряване на електрохимичните характеристики и стабилността на реокисление на Ni/BCY15 аноден катализатор за протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки чрез прилагане на нов подход за получаване - мокър химичен синтез с хидразин в среда от етиленгликол

Разработен е нискотемпературен (90°C) мокър синтез на Ni/BCY15 аноден катализатор с хидразин в етиленгликол. Методът е нов за областта на протон-проводящи твърдооксидни горивни клетки и осигурява не само запазване структурата на матрицата BCY15, но и по-добре диспергиран метален никел и по-силно взаимодействие Ni⁰-Ce³⁺ в сравнение със синтеза му във водна среда. Металната никелова фаза е по-стабилна по време на реокисление в сравнение с промишлен никелов катализатор, получен чрез процедура на механично смесване при висока температура (1100-1400°C). Тези фактори допринасят за подобряване на електрохимичните характеристики и стабилността на анода, както и за по-ниската скорост на дезактивация на катализатора по време на работа.

Ползите за обществото са: Разработен е нов подход за синтез на аноден катализатор за горивни клетки, които служат за получаване на електричество.

Разработката е отразена в:

Special Issue "Tuning the Physicochemical Properties of Nanostructured Materials through Advanced Preparation Methods", Nanomaterials 2021, 11(12), 3224; <https://doi.org/10.3390/nano11123224>

Title: New Insights on the Nickel State Deposited by Hydrazine Wet-Chemical Synthesis Route in the Ni/BCY15 Proton-Conducting SOFC Anode, by Dimitrinka Nikolova^{1*}, Margarita Gabrovska¹, Gergana Raikova², Emiliya Mladenova², Daria Vladikova², Krassimir L. Kostov³ and Yordanka Karakirova¹

¹Institute of Catalysis, Bulgarian Academy of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria

²Acad. Evgeni Budevski Institute of Electrochemistry and Energy Systems, Bulgarian Academy of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria

³Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria

2.2. Най-значимо научно-приложно постижение на ИК за 2021 г.

ЕПР анализ на свободно радикаловите компоненти и антиоксидантната активност на пчелен прашец преди и след гама-облъчване

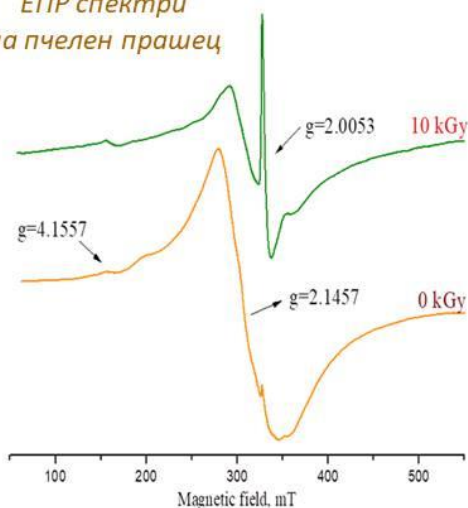
Ръководител: гл. ас. д-р Ралица Младенова



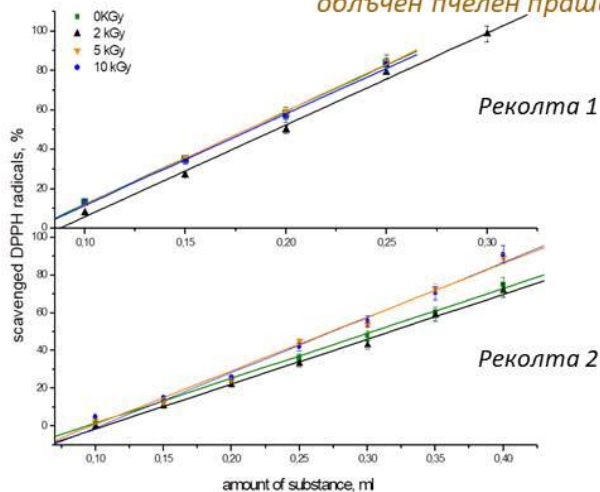
ОБЛЪЧВАНЕ НА ХРАНИ

Безопасен метод за дезинфекция и удължаване срока на годност.

ЕПР спектри
на пчелен прашец



Антирадикалова активност на необлъчен и
облъчен пчелен прашец



Пчелният прашец се счита за функционална храна, която е с висока хранителна стойност и е известна със своите антиоксидантни характеристики, които се предполага, че предпазват живите организми от окислително увреждане, в резултат се предотвратяват различни заболявания. Повечето натурални продукти се нуждаят от микробиологичен контрол за използването им като храна или лекарствен материал. Радиационната обработка е добре утвърдена нетермична технология за консервиране и микробно обеззаразяване на различни хранителни продукти, като по този начин се подобрява тяхната безопасност и срок на годност.

Гама-индуцираните свободни радикали и антирадикаловата активност на пчелен прашец са определени с помощта на ЕПР спектроскопия. Две проби от пчелен прашец от последователни реколти бяха изложени на гама-облъчване в дози от 2, 5 и 10 kGy. Регистрират се О-центрирани свободни радикали, индуцирани от гама лъчите. Техният сигнал нараства при увеличаване на използваната доза. Изучаването на ефектът от гама третирането върху антиоксидантната активност на екстрактите от пчелен прашец показва, че при двете реколти облъчването с едни и същи дози оказва различно въздействие. Установено е, че гама облъчването на пчелен прашец с 2 kGy води до слабо понижаване на антирадикалната активност на пробите от реколта 1, докато при пробите облъчени с 5 и 10 kGy от реколта 2 се наблюдава нарастване (10 %).

Представената разработка е първото изследване в световен мащаб на ефекта от гама радиацията върху антиоксидантната активност на пчелен прашец. За оптимизиране на дозата на облъчване на пчелен прашец с цел дезинфекция и удължаване на срока на годност, и същевременно за повишаване на антиоксидантната активност, определянето трябва да се извършва за всеки отделен натурален продукт и партида.

Разработката е отразена в:

Katerina I. Aleksieva^a, Ralitsa B. Mladenova^{a*}, Nikolay Y. Solakov^b, Kamelia K. Loginovskab, EPR analysis of free radical components and antioxidant activity of bee pollen before and after gamma-irradiation Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 2021, 327, 713-719, <https://doi.org/10.1007/s10967-020-07549-z>

^aInstitute of Catalysis, Bulgarian Academy of Sciences, Acad. G. Bonchev str., bldg. 11, 1113 Sofia, Bulgaria

^bInstitute of Cryobiology and Food Technologies, Agricultural Academy, 1407 Sofia, Bulgaria

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ЗВЕНОТО

3.1. В рамките на договори и спогодби на ниво Академия

Сътрудничеството в рамките на спогодби на ниво Академия обхваща 10 проекта: Институт по физикохимия на ПАН, Варшава-1; ИФ РА, Букурещ Румъния-3; Институт по макромолекулярна химия, гр. Яш, Румъния -1; Институт по наноматериали, Национален съвет за изследвания, Палермо, Италия-1, ИХТМ БУ, Белград, Сърбия-2; ИГТ-Прага, Чехия-1; Институт по геотехника на САН, Кошице, Словакия-1, Институт по катализ и нефтохимия, Мадрид-Испания. Темите на проектите са в областите на приоритетните научни направления, като екология, зелена химия, енергетика, нови материали. Получените от тези сътрудничества резултати 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 един проект по програмата Horizon 2020, Marie Skłodowska-Curie Research and Innovation Staff Exchange АКРОНИМ: CHemPGM и три проекта от програма COST (CA 18112, CA 17136, IG15102).

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 2021 г.

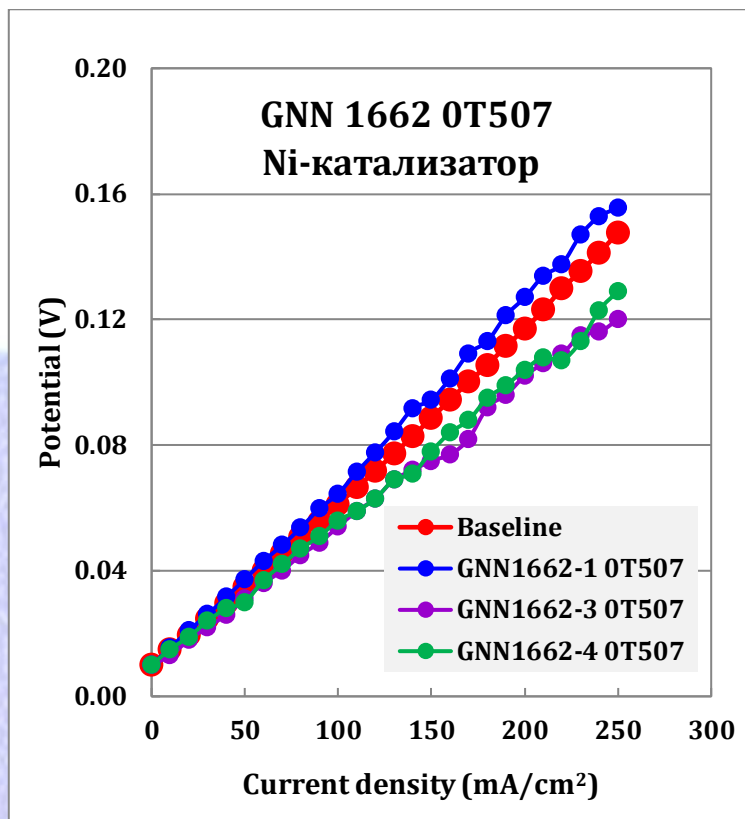
Договор с GenCell Ltd, Петах Тиква, Израел:

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

проф. д-р М. Габровска, доц. д-р Д. Николова, спец. химик Л. Билярска

Разработен е полупромишлен синтез на партида от 400 г аноден катализатор за алкални електролитни клетки на основата на никел и добавки от преходни метали. Достигнатата активност е идентична с тази на платинов катализатор като базова линия.

Полза за обществото: Получен е активен катализатор за алкални електролитни клетки с потенциал да замести скъпоструващите катализатори, съдържащи благородни метали.



Електрохимична активност на Ni- и Pt-съдържащите катализатори

4. УЧАСТИЕ НА ИК-БАН В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ

Научно-изследователския състав на ИК участва активно 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 2021 година в Института беше защитена една дисертация за присъждане на образователната и научна степен „доктор“ и беше зачислен един редовен докторонт по Научна специалност Химически науки (Химична кинетика и катализ).

През годината на територията на Института беше извършвана активна експериментална дейност, свързана с работата по проекти на ученици от столичните училища за участие в различни международни и национални състезания в областите химия и екология. Беше използван STEM подход на учене и преподаване. Ученици от 91. НЕГ под ръководството на гл. ас. д-р Петя Петрова посещаваха периодично ИК за провеждане на лабораторни експерименти. Те получиха специална награда на регионалния кръг на състезанието „Jugend forscht“ („Младежта изследва“) - Германия.

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 2020 г., за срок от 6 години ИК получи 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“.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО И АНАЛИЗ НА НЕЙНАТА ЕФЕКТИВНОСТ

Съгласно класификацията на Центъра за иновации към БАН, основната част от разработките на ИК през 2021 г. са на различен етап от фаза IR – изследователска фаза.

В ИК съществуват значителен брой иновационни научни продукти, които са 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 и скуарилови багрила за приложение в оптичната електроника и 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.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО

През 2021 г. ИК – БАН има приходи в размер на 5 105 лв. от отдаване под наем на помещение в бл.12, ал.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, Електронен парамагнитен резонанс, Ултравioletови спектри

по утвърден ценоразпис публикуван на интернет страницата на Института. За 2021 г. от сервизни услуги ИК има приходи в размер на 10 398 лв.

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ЗВЕНОТО ЗА 2021 Г.

№.	Наименование на приходите / разходите	Изпълнение
I.	ПРИХОДИ	148 946
	1. Приходи от продажба на услуги, стоки и продукция	143 841
	2. Приходи от отдаване под наем на недвижимо имущество	5 105
II.	РАЗХОДИ	1 804 296
	1. Заплати и възнаграждение на персонала нает по трудови правоотношения	1 057 132
	2. Други възнаграждения и плащания за персонала	237 197
	В т.ч. – за нещатен персонал по трудови правоотношение	33 550
	- за персонала в извънтрудови правоотношения	29 950
	- обезщетения с характер на възнаграждения	30 575
	- други плащания и възнаграждения	143 122
	3. Осигурителни вноски от работодателя за ДОО	143 965
	4. Здравноосигурителни вноски от работодателя	55 563
	5. Вноски за допълнително задължително осигуряване	25 639
	6. Издръжка	240 001
	в т.ч. – учебни и научно-технически разходи	82
	- материали	72 209
	- вода, горива и енергия	53 960
	- разходи за външни услуги	47 574
	- текущ ремонт	38 855
	- командировки в страната	14 256
	- командировки в чужбина	11 072
	- разходи за застраховки	88
	- други финансови услуги	501
	- други разходи	1 404
	7. Платени данъци, такси и административни санкции	5 644
	8. Стипендии	11 628
	9. Придобиване на ДА	27 527
	в т.ч. - компютри и хардуер	5 588

- друго оборудване, машини и съоръжения	16 788
- програмни продукти	5 151
III. БЮДЖЕТНА СУБСИДИЯ	1 386 842

IV. ТРАНСФЕРИ	337 569
----------------------	----------------

V. ФИНАНСИРАНЕ

в т.ч. - остатък по сметки от предходния период	263 825
- остатък по сметки в края на периода	404 302

VI. Средногодишна брутна работна заплата на едно лице	1 602
--	--------------

Приходи в размер на 10 398 лева от извършени услуги и анализи.

Приходи от договори за научни разработки с организации от чужбина – 132 983 лв. по два договора с GenCell Израел.

Приход във връзка с „Национална програма – Млади учени и постдокторанти“ в размер на 37 782 лв.

Приходи по 4 договора с Фонд „Научни изследвания“ – 211 567 лв.

Приходи по договор „Консорциум за изпълнение на Национална научна програма „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита (ЕПЛЮС)“ – 45 559 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“ – 48 640 лв.

Приходи по договор по програмата Horizon 2020, Marie Skłodowska-Curie Research and Innovation Staff Exchange АКРОНИМ: CHeMPGM - 150696 лв.

Наличност в СЕБРА към 31.12.2021 г. - 561 309 лв.

8. ИЗДАТЕЛСКАТА И ИНФОРМАЦИОННА ДЕЙНОСТ.

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

проф. д-р Силвия Тодорова

Гост редактор на Special Issue "Catalysts", "Catalysts Based on Mesoporous Materials for Environmental Application"

Гост редактор на Special Issue "Symmetry" , "Heterogeneous Catalysis: Topics and Advances

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.

проф. д-р Зара Черкезова-Желева

- Nanoscience and Nanotechnology

проф. д-р А. Елияс

- Nanoscience and Nanotechnology

проф. дн Ив. Митов (асоцииран член)

- Mössbauer Effect Reference and Data Journal

проф. дн Н. Йорданов (асоцииран член)

- Bulletin of the Chemists and Technologists of Macedonia;
- Electronic Journal of Theoretical Physics;
- Radiation Science and Technology.

доц. д-р Мария Колева

- Springer Nature Applied Sciences (SNAS)

доц. д-р Йорданка Каракирова

- Academic Reads Journal of Physics
- Гост редактор на Special Issue „Molecules”, “Applied EPR Spectroscopy”.

доц. д-р Ч. Бонев

- Bulgarian Chemical Communications;
- Химия и индустрия - Зам. главен редактор

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. дн, 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. 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. Таня 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_zh_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;