

**ИЗВЛЕЧЕНИЕ ОТ
ОТЧЕТЕН ДОКЛАД
за 2014 г.**



ДИРЕКТОР:

/Проф. С. Раковски/

Януари, 2015 г.

УВОД

Институтът има заети общо 57 щатни бройки. Разпределението на служителите по категории е следното: професори - 7, доценти - 15, главни асистенти – 14.5, асистент – 3.5, химици – 6, администрация – 4, помощен и обслужващ персонал – 7. Доктори на науките - 3 служители, доктори - 36 служители.

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ЗВЕНТО

1.1. Преглед на изпълнението на целите /стратегически и ефективни/ и оценка на постигнатите резултати и на перспективите на звеното в съответствие с неговата мисия и приоритети съобразени с утвърдените през 2014 г. научни тематики

Институтът по катализ (ИК) е водещ изследователски научен, научно приложен, иновационен център и център за подготовка на специализирани кадри в България и Югоизточна Европа по фундаментални и приложни изследвания в областта на хетерогенния и хомогенния катализ, химичната кинетика, химичната стабилизация, специфичните изследователски методи, приложими в катализа. Тематиката на Института по катализ като звено от научно направление 3 от структурата на БАН: „Нанонауки, нови материали и технологии“ е в пълно съответствие с приоритетите на направлението. В ИК се създават нови наноразмерни катализатори с регулирана структура и свойства, приложими в химическата промишленост, процеси за опазване на околната среда, получаване на алтернативни горива – водород, оползотворяване на нови енергийни източници и др.

Изучават се кинетиката и механизъмът на хетерогенни и хомогенни каталитични реакции; разработват се научни основи за подбор на нови каталитични системи; изучават се на атомно ниво с квантово-химични методи каталитични превръщания; работи се върху химична стабилизация на органични материали, изследва се реакционната способност на органични съединения, развиват се методично и методологично методите на ЕПР и ЕНДОР.

Широко се използват съвременни физични методи като рентгенова фотоелектронна спектроскопия, рентгеноструктурен анализ, инфрачервена и ултравиолетова спектроскопия, температурно програмирана десорбция, редукция и окисление, диференциална сканираща калориметрия, Мьосбауерова спектроскопия, ЕПР и др.

Тематични приоритети на ИК са в тясна връзка с приоритетите на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2020 г. През 2014 г. беше утвърден научно-изследователски план на ИК за периода 2014-2016 г, който включва 3 основни научни тематики:

- 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.**

В рамките на **първата** научна тематика се работи по следните задачи:

Задача 1. Получаване на нови каталитични материали и адсорбенти посредством неконвенционални методи – плазмохимични методи с използване на плазма получени с висока чистота и потопен електрод, механохимична активация.

Чрез плазмохимичен синтез са получени смесени оксиди CoFe_2O_4 с шпинелна структура, представляващи нанокomпозитен материал с магнитна сърцевина, покрита с изолационен слой SiO_2 . Посредством екстракция с висококипящ разтворител (1,2-дихлорбензол с т.к. 180°C) са изолирани фулерени, съдържащи се в термомодифицирания материал от масивната графитова мишена. Анализите показват, че основната фаза е фулерен C_{60} с малки примеси от C_{70} . Синтезирани са в неводна среда серия катализатори с активна фаза от никел-паладий и носител плазмено синтезирани въглен, алуминиев оксид, алуминиев хидроксид и силициев оксид. Катализаторите са изследвани в реакции на разлагане на озон, минерализиране на толуол и като католи за алкални горивни клетки.

Изяснени са някои страни от състава, структурата и свойствата на биогенни продукти от жизнената дейност на железни бактерии от рода *Sphaerotilus-Leptothrix* получени в природни и лабораторни условия. Постигнатите резултати са в основата на предложението за нов проект в

конкурса обявен от ФНИ през 2014 г. и е сключен договор за финансиране на изследвания за периода 2015-2016 г.

С използване на механохимично активиране са модифицирани природни материали (илменит, яйчени черупки) и са синтезирани наноразмерни материали (TiO_2 , арагонит). Получените продукти могат да намерят приложение за композити, катализатори за процеси свързани с опазване на околната среда и др.

Задача 2. Получаване на нови каталитични материали и адсорбенти посредством конвенционални методи.

Синтезирани са смесенооксидни Cu, Fe, Ni, Co системи върху активен въглен с голяма специфична повърхност и добре изразена микро-мезопореста структура. Активният въглен е получен като са използвани суровини от отпадъчни биомаси.

Разработен е нов аноден катализатор на база никел и добавки от преходни метали, подходящ за алкални електролитни клетки.

Чрез контролирано термично разлагане във въздушна атмосфера на Co-Al и Ni-Al слоести двойни хидроксида са получени наноразмерни смесени метални оксиди, шпинело-подобни смесени оксиди и добре дефинирани CoAl_2O_4 или NiAl_2O_4 шпинели, които са подходящи материали за получаването на зелено, тюркоазено или синьо оцветени керамични пигменти с различни свойства и приложения.

Получени са златни катализатори с носител CeO_2 дотиран с празеодим и итрий. Изяснена е връзката структура-каталитично действие в реакциите на конверсия на CO с водна пара (КВОВП) и селективно окисление на CO (COBO) в зависимост от метода на получаване на смесенооксидния носител.

Задача 3. Приложение на квантовохимични методи в катализа.

Теоретично са изследвани влиянието на морфологията, електронната структура, и киселинно-основните свойства на дотирани с азот и сяра повърхности на анатаз върху формирането на каталитичен център. Моделирана е структурата и са изследвани електронни свойства на дотиран с азот и сяра масивен анатаз- TiO_2 . Симулирани са термичното поведение на графит и процесите на отлагане и формиране на въглеродни наночастици от плазма с методите на класическа молекулярна динамика (пакет програми LAMMPS). Продължи разработката на принципа на boundedness въведен от М. Колева в излязлата от печат през 2012 авторска монография "Boundedness and Self-Organized Semantics: Theory and Applications", IGI-Global, САЩ. Доказана е връзка между фракталността на една комплексна система и ефективността на отклика ѝ.

Работата по **втората** научна тематика е съсредоточена върху следните задачи:

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

Разработен е нов подход за решаване на енергийния и екологичен проблем чрез дълбочинна преработка на отпадна биомаса, третирана като суровинен източник. Основно внимание се отделя на получаването, пречистването и съхранението на водорода чрез каталитични процеси. С прилагането на съвременни методи са получени нови наноразмерни масивни $\text{Zn}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$, $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$, $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$, $\text{Cu}_{1-x}\text{Co}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$, $\text{Ni}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$, $\text{Mg}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$, $\text{Cu}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ и нанесени Fe-O/C, Co-O/C, Cu-O/C, Fe-Co-O/C, Fe-O/SBA-15, Fe-Pt-O/C, Au/CeO₂, Au/Fe-Ce-O, Au, Pd/TiO₂+CeO₂, Fe₂O₃ и NiO, Au+CeO₂/C, Co-Mn-O/SiO₂, Ag/C, TiO₂ каталитични материали. Направена е предварителна селекция на каталитичните материали, показващи висока ефективност в реакциите за обогатяване на газовата компонента с водород чрез конверсия на въглероден оксид с водна пара, почистване на водорода чрез селективно окисление на въглероден оксид и каталитично разлагане на алкохоли до H₂.

Получени са Ni катализатори за реформинг на биогаз до водород (реформинг на метан с CO₂), нанесени върху смесени CeO₂-Al₂O₃ носители с различно съдържание на CeO₂.

Получени са високо активни Pd-La₂O₃-Al₂O₃ катализатори за реакциите на реформинг на метан с водна пара и автотермичен реформинг. Установено е, че високата скорост на реакцията на реформинг на метан с водна пара и степента на превръщане на метан в присъствие на La-съдържащи Pd катализатори се дължи на т. н. Pd⁰[Pd^{δ+}O_xLa] адукти, промотиращи активирането на CH₄ и окислението на въглерод-съдържащи съединения.

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

Посредством импрегниране (ИМ) или микроемулсионен (МЕ) метод са получени наноструктурни златни катализатори, нанесени върху Pt-модифициран цериев диоксид, за конверсия на CO с водна пара и селективно окисление на CO в богати на водород смеси.

Изследвани са физикохимичните свойства на системата W/ γ -Al₂O₃, получена чрез импрегниране и промотирана с никел и калий в реакцията конверсия на въглероден оксид с водна пара (КВОВП) в присъствие на в H₂S. Установено е, че оксидните структури, формирани на повърхността на W-, KW-, и NiW- образци, не са благоприятни прекурсори на каталитично активни форми в сравнение с оксидните структури, образувани на повърхността на трикомпонентната KNiW система. Нейната умерена редуцируемост и стабилността на серните структури при окисление води до най-висока и постоянна степен на превръщане на CO, близка до равновесната стойност при висока температура.

Задача 3. Катализатори за хидрогениране на нефтени фракции.

Изследвани са активностите на промишлени CoMo/Al₂O₃ катализатори в реакцията на хидродесулфуриране на тиофен. Показано е, че предварителното коксуване на катализатора води до значително намаляване на неговата хидродесуфурираща активност, докато селективността му към формиране на бутан расте. Показано е, че при специфични условия на коксуване е възможно повишаване на селективността към някои от продуктите на реакцията.

Синтезирани са Mo, Ni-Mo и Co-Mo катализатори чрез импрегниране при използването на различни носители. На образците е проведена механохимична активация с различна продължителност на обработка. Изследвана е активността и селективността на катализаторите в реакцията на ХДС на тиофен при атмосферно налягане.

Научните изследвания по **тема 3** от плана за работа 2014-2016 г., включва работата по следните задачи:

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

Изследвани са свойствата и активността на никелови катализатори за частично хидрогениране на растителни масла, синтезирани върху различни SiO₂-съдържащи носители: перлит, силикагел и диатомит. Направена е оценка за възможността за приложението на перлит като носител на катализатор за частично хидрогениране на растителни масла. Изследван е ефектът от присъствието на добавка от магнезий върху структурата, текстурата и активността на никелови катализатори в реакцията на частично хидрогениране на слънчогледово масло. Установено е, че чрез правилен подбор на силикатният носител е възможно да се контролира взаимодействието Ni-O-Si и редуцируемостта на Ni²⁺-O структурите, генериращи достъпни активни центрове от метален никел на повърхността, така и дифузията на триглицеридните молекули през порите на катализатора, с което се постига по-висока по-висока активност при хидрогениране на слънчогледово масло за хранителни цели.

Задача 2. Дозиметричен контрол и идентифициране на облъчени храни и лекарства с използване на ЕПР спектроскопия.

Идентифицирани са гама-облъчени житни храни и български лекарства, с помощта на ЕПР спектроскопия. След облъчване на тези вещества се регистрират специфични ЕПР спектри, които са недвусмислено доказателство за радиационно третиране.

С цел извършване на дозиметричен контрол при работа с йонизиращи лъчения, в ИК от няколко години се разработват дозиметри на база твърдо тяло. През изминалата година бяха тествани различни захарид, за приложението им като радиационно чувствителни материали в твърдо тяло/ЕПР дозиметрите.

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

Изучени са кинетичните закономерности на реакциите на озон с парафини с различен строеж в разтвор. Установено е, че скоростната константа на реакциите зависи от структурата и енергията на C-H връзките. Разгледани са някои нови аспекти на реакцията на озона с еластомери с различни конфигурации на двойните връзки и различни заместители в разтвор. Предложен е механизъм на

реакцията на озона с различните видове еластомери, който обяснява образуването на всички идентифицирани функционални групи.

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

Синтезирани са смесени мед-кобалтови ферити, които са структурно характеризирани и тествани в реакциите на пълно окисление на CO, метанол и диметилетер. Те показват висока активност по отношение на окисление на CO и CH₃OH (около 100% конверсия на CO и CH₃OH при 160°C).

Получени са високоактивни и стабилни паладиеви катализатори, нанесени на модифициран с кобалтов оксид γ -Al₂O₃, за почистване на отпадъчни газове от метан. На тази база се разработват структурирани катализатори (монолити) с цел реално приложение в промишлеността.

Синтезирани са катализатори на основата Pt и Pd, нанесени върху наноразмерни оксиди - Co₃O₄, Mn₃O₄ и Fe₃O₄. Установено е висока активност в реакциите на пълно окисление на метан, хексан и CO в резултат на формиране на фино дисперсни фази от благородния метал на повърхността на оксидите.

Синтезирани са наноразмерни моно-(Au, Pd) и биметални Au-Pd катализатори, нанесени на модифициран с железни йони цериев диоксид. Катализаторите проявяват висока активност в реакцията на пълно окисление на бензен пълно окисление е постигнато при 200 °C).

Получени и охарактеризирани с физични методи са следните наноразмерни фотокатализаторни образци: TiO₂-ZnO, ZnO – полимер, M/ZnO (M=Mn, Co, Ni, Ag), TiO₂-CeO₂, Ag/ZnO, La/ZnO, CoO-Fe₂O₃, TiO₂/AC под формата на прахове образуващи суспензии или като тънки слоеве. Тези образци са изследвани във фотокаталитично почистване с видима светлина на водни разтвори от азобагрила, които се използват в текстилната промишленост.

Получени и охарактеризирани са следните наноразмерни фотокатализатори: азот-дотиран WO₃/TiO₂ и Au/азот-дотиран WO₃/TiO₂. При облъчване със слънчева светлина е установена висока фотокаталитична активност в реакциите на пълна деструкция на 2,4,6-тринитротолуол (опасен и токсичен материал)

Изследвана е каталитичната активност на сребърен катализатор в реакцията на разлагане на озон. Катализаторът е получен чрез нанасяне на сребро върху перлит посредством спрей-пиролиз. Перлитът е от български минерални находища в Родопите, област Джебел.

Съгласно Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2020, научните изследвания и иновациите са от ключово значение за трансфера на знания в производството и прехода към икономика, основана на знанието. В съответствие с тези акценти, ИК разшири и задълбочи иновационната си дейност и изгради банка от предложения с готови за внедряване решения. В момента тя включва 15 иновативни предложения.

1.2. Изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2020. Извършени дейности и постигнати резултати.

Стратегическата цел на Националната стратегия за развитие на науката 2020 е да подпомогне развитието на науката в България за превръщането ѝ във фактор за развитието на икономика, базирана на знанието и иновационните дейности.

Характерът на изследванията в ИК и мултидисциплинарният подход в научното търсене изцяло се вписват в тази главна стратегическа.

ОПЕРАТИВНА ЦЕЛ 1. Повишаване на динамичността, резултатността и ефективността на научноизследователската и развойна дейност в полза на икономиката и обществото

Дейност 1.2. Усъвършенстване на модела на финансиране на приоритетни научни изследвания.

Съгласно Стратегията за развитие на науката в България до 2020 г, пет са приоритетните направления на научни изследвания. В ИК се работи по три от тематичните направления..

1. Енергия, енергийна ефективност и транспорт. Развитие на зелени и екотехнологии.

Учените от ИК продължават да работят и имат сериозни постижения в разработването на нови катализатори за получаване на водород. Особено внимание се отделя на получаването на водород от

възобновяеми въглерод-съдържащи суровини (биогаз) чрез процеси на реформинг на метан и следващото му очистване от CO, посредством реакциите на конверсия на CO с водна пара (КВОВП) и селективно окисление на CO (PROX). Създават се нови катализатори за получаване на екологично чисти горива. Традиционно и важно направление в ИК е екологичния катализ. Разработват се катализатори, адсорбенти и химически процеси за очистване на газове, води и почви от опасни и токсични компоненти, катализатори за разлагане на озон.

2. Здраве и качество на живота, биотехнологии и екологично чисти храни.

В ИК се разработват наноразмерни катализатори за частично хидрогениране на растителни масла и технология за получаване на висококачествени хидрогенирани масла за хранително-вкусовата промишленост; дозиметричен контрол и идентифициране на облъчени храни и лекарства с метода на ЕПР; синтезирани са фото- и термо-чувствителни спиро-органични съединения, като био-маркери, електронни комутатори и др. Разработват се процеси на деструкция и стабилизация на органични материали. Разработват се процеси за дезактивация и минерализация на органични замърсители във въздух, води и почви чрез озонлиз и фотокаталитични процеси и комбинация от тях.

3. Нови материали и технологии.

В ИК се създават нови наноразмерни катализатори и адсорбенти с регулирана структура и свойства, приложими в химическата промишленост, процеси за опазване на околната среда, получаване на алтернативни горива - водород, оползотворяване на нови енергийни източници и др. Прилагат се различни методи, както конвекционални, така и неконвенционални – плазмохимични методи, механохимична активация. Разработени са процеси за плазмохимичен синтез на наноразмерни неорганични материали.

Дейност 1.3. Развитие на научния потенциал чрез създаване на привлекателни условия за научна кариера, професионално израстване, квалификация и специализация на учените.

Създават се оптимални условия за научно израстване и пълноценна реализация на учените от ИК. Студентите и докторантите, обучавани от наши учени, намират успешна реализация в силно конкурентното европейско научноизследователско пространство.

През 2014 г. двама учени от ИК спечелиха конкурси за заемане на академични длъжности „доцент“ по направление 4.2. Химически науки, специалност 01.05.16 „Химия на твърдото тяло“ – и един по научна специалност „Химична кинетика и катализ“. Един учен е спечелил конкурс за заемане на академична длъжност „професор“.

ИК е партньор в съвместен проект с ИОНХ и ФХФ СУ на тема: „Създаване на висококвалифицирани специалисти по съвременни материали за опазване на околната среда: от дизайн до иновации“ BG051PO001-3.3.06-0050 по Оперативна програма „Развитие на човешките ресурси“, Европейски социален фонд. Учени от ИК са съръководители на 4 от модулите в работната програма и участници в Управителния съвет на проекта. При изпълнение на работната програма по проекта са представени лекции и са проведени упражнения с членове на целевата група. В рамките на проекта младите учени имаха възможност да представят научните си постижения на редица международни и национални научни мероприятия.

Дейност 1.4. Интегриране на науката в България в Европейското изследователско и университетско пространство.

Сътрудниците на ИК работят по съвместни проекти и програми, включени в двустранни и многостранни сътрудничества, международен обмен по COST, Дунавската стратегия, други международни организации и отделни страни в Европа. Нашите учени гостуват като лектори и специалисти в чужди университети, изследователски центрове и фирми по покана и въз основа на спечелени конкурси, специализации и изпълнение на съвместни проекти.

ОПЕРАТИВНА ЦЕЛ 2. Изграждане на устойчива връзка образование – наука – бизнес като основа за развитие на икономика, базирана на знанието

Дейност 2.2. Засилване на интеграцията между елементите на „триъгълника на знанието“

Съществена част от дейността на учените от ИК е свързана с осъществяването на постоянни консултации и експертизи за български и чужди държави, министерства, общини, агенции, фирми, подкрепа за реализирането на нови иновативни проекти, създаване на нови продукти и технологии на световно ниво.

ОПЕРАТИВНА ЦЕЛ 3. Изграждане на благоприятна среда за научна дейност

Дейност 3.2. Развитие на научната и иновационна инфраструктура

ИК е участник в национална изследователска инфраструктура за производство и изследване на нови материали с приложение в промишлеността, био-медицината и околната среда (ИНФРАМАТ) с координатор Институт по физикохимия при БАН.

ИК участва в изработване на идейни проекти и формирането на консорциуми за следните центрове:

1. Център за върхови постижения „МАТЕРИАЛИ ЗА УСТОЙЧИВ РАСТЕЖ“.
2. Център за компетентност „ОПОЛЗОТВОРЯВАНЕ НА ОТПАДЪЦИ“.

1.3. Полза/ефект за обществото от извършваните дейности

Резултатите от научните изследвания, провеждани в ИК, имат непосредствен ефект за решаване на много от основните фундаментални проблеми в катализа, иновативните, технологични, екологични и социални проблеми, свързани с неговото приложение. Те са свързани с ефективно използване на наличните суровини и създаване на нова суровинна база; създаване на ефективни системи за опазване на околната среда; усвояване на нови източници на енергия; създаване на нови вещества и материали с предварително зададени свойства; разработване на нови и усъвършенстване на съществуващите технологии и процеси.

Цялостната научна дейност на ИК следва приоритети на развитието на световната каталитична наука и резултатите от фундаменталните ни изследвания са намерили и намират все широк международен отзвук и признание.

Постигнатото от нас има пряк ефект за цялото общество, включващ разработени методи, катализатори и технологии за:

Получаване на водород от възобновяеми и въгледородни източници;

Получаване на чист водород за горивни клетки (с методите КВОВП и PROX);

Каталитично почистване на отпадъчни газове, води и замърсени почви;

Наноразмерни материали;

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;

Синтез на органични съединения с биологична активност – биологични маркери за медицината и електрониката на основата на спиро-циклични съединения;

Нови типове дозиметри за определяне на интензивността на радиация с използване на въглехидрати;

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 и индустриални предприятия. ИК има рамкови договори с ХТМУ - София, Факултет по химия и фармация на Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Университет „Проф. д-р Ас. Златаров“ - Бургас, ПУ „Паисий Хилендатски“, ТУ - Ст. Загора, Русенски университет „Ан. Кънчев“ - клон Разград.

В чужбина ИК има сключени рамкови договори с университетите: Московски държавен университет „В. М. Ломоносов“, Институт по катализ „Акад. Г. К. Боресков“ при Сибирското отделение на РАН - Новосибирск, Институт по биохимична физика „Акад. Н. М. Емануел“ на РАН - Москва, Институт по органичен катализ и електрохимия „Акад. Д. В. Соколски“ - Алмати,

Казахстан, Институт по неорганична химия към ЛАН - Латвия, Институт по елементорганични съединения „А. Н. Несмеянов“ на РАН, Федерален университет на Сан Карлос, Сао Паоло, Бразилия, Институт по катализ и нефтохимия, Мадрид, Испания, Белградски университет, Институт по химия, технология и металургия, Сърбия, Институт по физикохимия на РА, Букурещ, Факултета по неорганична химия към университета в Севиля, Испания, университета du Littoral-Côte d'Opale(UCSEIV), Дюнкерк, Франция. Сключено е споразумение със САБИК, Саудитска Арабия за подготовка на кадри. Съществена част от темите, по които се работи в ИК, са в рамките на договори и спогодби на ниво академии на науките.

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

ИК няма пряко регламентирани общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата, но като общонационално значими бихме могли да посочим следните:

ИК е седалище на Клуб на българските катализи (КБК), обединяващ 126 специалисти, работещи в областта на катализа от научните институти, университети и индустрията в страната. КБК е колективен член на Съюза на химиците в България, на Европейската федерация на каталитичните дружества (European Federation of Catalysis Societies, EFCATS) и на Международната асоциация на каталитичните дружества (International Association of Catalysis Societies, IACS). Елемент от структурата на ИК е Националният център по ЕПР спектроскопия. ИК е седалище на Българското ЕПР дружество от 1991 г. През 2015 г. предстои провеждането на традиционният симпозиум по хетерогенен катализ - 11-ти по ред.

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2014 г.

Научната дейност на ИК изцяло е изградена на проектен принцип. През 2014 г. беше приет научно-изследователски план за периода 2014-2016 г., който е в съответствие с Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2020 и рамковата програма на Европейския съюз за научни изследвания и иновации Хоризонт 2020. ИК се работи по 3 основни тематични направления, всяко от които включва няколко задачи. Всяка една от задачите се изпълнява посредством различни типове проекти. В ИК се работи по 1 проект по COST, 9 проекта финансирани от ФНИ, 14 – ЕБР и съвместни проекти с фирмите „Техкерамик“ ООД Мездра и „GenCell Ltd“, Израел.

През изминалата година бяха спечелени 3 проекта в рамките на конкурс „Финансиране на научни изследвания в приоритетни области -2014 г.“ с базова организация Институт по катализ. В още 3 проекта по конкурса институтът е съизпълнител.

Броят на публикации, които са реферирани и индексирани в световната система за реферирание, индексирание и оценяване е 53, а на тези, които не са включени в световната система за реферирание, индексирание и оценяване е 29. Проф. Раковски и доц. М. Аначков са съавтори на 6 глави от книги. Учени от ИК са участвали в 24 международни конференции с устни (4 бр.) и постерни (41 бр.) доклади. Участията на национални конференции са над 20. Статиите, които са включени в издания с импакт фактор IF или импакт ранг SJR са 34. От тях 15 са с IF под 1, 5 с IF между 1 и 2, 2-с IF=3-4, 6 с IF =3-4 и 5 с IF над 4.

Статията , “Gold-modified N-doped TiO₂ and N-doped WO₃/TiO₂ semiconductors as photocatalysts for UV-visible light destruction of aqueous 2,4,6-trinitrotoluene solution”, с автори М. Daous, V. Iliev, L. Petrov, публикувана в J. Mol. Catal. A: Chemical, 392 (2014) е в **списъка Top 25 Hottest articles of 2014.**

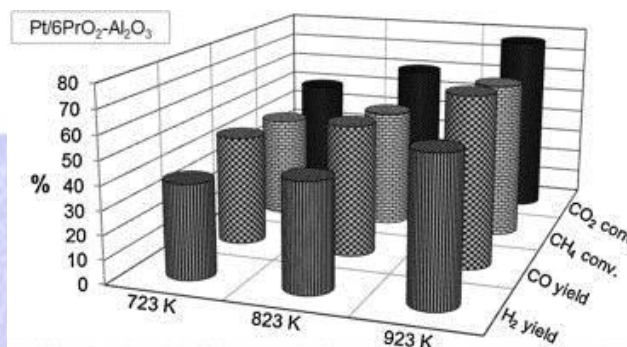
За изтеклата 2014 г. броя на цитираните публикации на учените от ИК е 1021. Трябва да се отбележи, че продължава цитирането на научни статии, публикувани през осемдесетте и деветдесетте години, което е потвърждение за високата научна стойност на получените резултати.

Проф. дн С. Дамянова беше номинирана от жури към Министерството на образованието за наградата „Питагор“ за утвърден учен в природните науки и математиката.

2.1. Най-важно и ярко научно постижение на ИК - БАН за 2014 г.

Разработена е лабораторна технология за получаване на екологично чистото гориво водород чрез реформинг на биогаз, за чието производство са използвани местни възобновяеми

суровини, което има принос към националната стратегия за устойчиво развитие. Създадени са високо ефективни, нанесени върху смесени $x\text{PrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ оксиди, Pt катализатори за реформинг на биогаз до водород. Установено е оптимално взаимодействие между активните метални частички и кислородните ваканции на повърхността на смесени носители при определена концентрация на лантаноиден оксид ($\text{PrO}_2 \geq 6$ тегл.%), което от своя страна е отговорно за високата каталитичната активност и стабилност на катализатора в резултат на повишената дисперсност на активната метална фаза и резистентност към отлагане на кокс. Създадените високо активни и стабилни катализатори ще могат да гарантират интензивен процес на реформинг на биогаз до водород, което ще увеличи възможността за използването на възобновяеми източници, способни да генерират устойчиво енергия. (Ръководител-проф. дн Соня Дамянова; колектив-доц. д-р К. Ариширова, д-р Ивайло Танков)

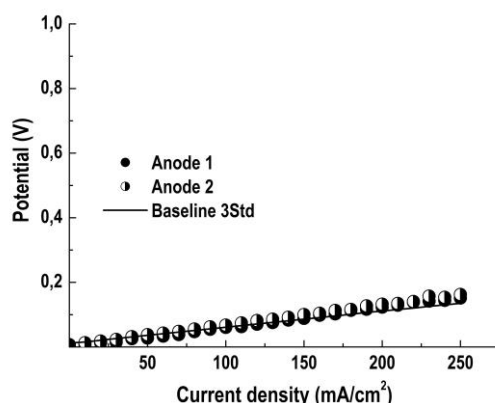


2.2. Най-важно и ярко научно-приложно постижение на ИК за 2014 г.

Създадени са серия нови анодни катализатори за алкални горивни клетки на базата на метали от 8 група, нанесен върху електропроводим носител с различно съдържание на активни компоненти и модифициращи добавки при различни методи на предварителна редукция. На основата на патента са получени производствени количества катализатори, тествани в промишлени генератори. Те показват еднакво електрохимично поведение с това на стандартни катализатори с активен компонент благороден метал (фиг.1)

Съвместно с колектив от фирмата ГенСел от Израел беше създаден патент: „Аноди за алкални електролитни клетки на база неблагородни метали“, заявен в американското патентно ведомство - Appl. No. 61/954,704, Assignee: Gencell, Petah Tikva, Israel.

От българска страна разработващият колектив е с ръководител е проф. дн С. Раковски и участници - доц. д-р М. Габровска, гл. ас. д-р Д. Николова и спец. химик Л. Билярска.



Фиг. 1. Волт-амперна характеристика на стандартния електрохимичен модул и на тези приготвени с новите катализатори Anode 1 и Anode 2.

4. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ЗВЕНТО

Междуакадемичното сътрудничество обхваща 14 проекта, а между-институтското сътрудничество се осъществява в рамките на 4 проекта. Договорите са сключени предимно със страни от Европейския съюз: Белгия, Испания, Италия, Полша, Чехия, Словакия, Латвия и Румъния, но също и със страни извън ЕС – Русия, Сърбия, Бразилия и Индия.

4.1. В рамките на договори и спогодби на ниво Академия

Сътрудничеството в рамките на спогодби на ниво Академия обхваща 14 проекта. Институт по биохимична физика „Акад. Н. М. Емануел“ на РАН – Москва-1; Институт по физикохимия на Полската Академия на Науките, Варшава-1; ИФ РАН, Букурещ Румъния-3; ИХТМ БУ, Белград-3, Сърбия; ИГТ-Прага, Чехия-1; Институт по елементоорганични съединения А.Н. Несмеянов – РАН, Москва -1; Институт по биохимична физика „Акад. Н. М. Емануел“ на РАН – Москва; Институт по неорганична химия към ЛАН – Латвия-1. Темите на проектите са в областта на приоритетните научни направления – екология, зелена химия, енергетика, нови материали. Резултат от тези сътрудничества са 14 публикации.

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

Между-институтското сътрудничество се осъществява в рамките на 5 проекта с:

- Факултета по неорганична химия към университета в Севиля, Испания,
- Университета du Littoral-Côte d’Opale(UCEIV), Dunkerque, Франция;
- Федерален университет на Сан Карлос, Сао Паоло, Бразилия;
- Институт по катализ и нефтохимия, Мадрид, Испания;
- Университет в Торино, Италия.

Научната продукция в резултат от международното сътрудничество обхваща публикации предимно в престижни международни списания (Applied Catalysis A, Applied Catalysis B, Catalysis Today, Catalysis Letters, Catalysis Communication и др.). Редица чуждестранни учени са гостували на ИК БАН.

В ИК успешно се работи по един проект от програма COST (CM 0903/WG 02).

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

В ИК се работи по два договора в рамките на двустранно научно-техническо сътрудничество - с Индия и Словакия.

5. УЧАСТИЕ НА ИК-БАН В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ

Учените от ИК активно участват в подготовката на дипломанти, докторанти и специалисти с изнасяне на лекции и водене на семинарни занятия.

Учени от ИК участват в работата на научни журита при защита на дисертации за научна степен доктор и доктор на науките и в конкурси за академични звания. (Таблица 26 от приложенията).

Положителен факт е наличието на тесни връзки на ИК с университети в България и с научни 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 Федералния университет на Сан Карлос, Сао Паоло, Бразилия и университет „Проф. д-р Ас. Златаров“ в Бургас. Проф. дн И. Митов води три лекционни курса в ХТМУ София: „Катализ и катализатори“, „Методи за изследване на неорганични химични производства“, „Наноматериали в неорганични химични производства“, един курс в Пловдивски университет „Мониторинг и екологично право“. Чл.-кор. Л. Петров чете лекции и води семинари в Университет „Крал Абдул Азис“ в гр. Джеда, Саудитска Арабия.

Доц. В. Алексиев и доц. Т. Халачев са организатори и лектори на курс по приложна квантова химия, базиран на програмния пакет „**Quantum Espresso**“ на тема: „Практика и приложение на моделиране на системи за съхранение на водород и покрития на соларни панели“. Курсът беше финансиран от Изследователския университет в гр. Кувейт и включва 33 ч лекции и 55 ч практически упражнения. В него бяха обучавани колеги от този университет.

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

акредитационната комисия са 9.63 за специалност „Химична кинетика и катализ“ и 9.54 за „Химия на твърдото тяло“.

През 2014 година в института са се обучавали общо 4 докторанти- редовна докторантура. Двама от тях се обучават по специалността „Химична кинетика и катализ“ и двама – по „Химия на твърдото тяло“. През 2014 г. успешно беше защитена една дисертация за научна и образователна степен „доктор“.

ИК е регистриран като работодател по проекта „Студентски практики“ на оперативна програма „Развитие на човешките ресурси“, като 8 учени от института са се регистрирали като ментори. Практическото си обучение в ИК са провели 4 студенти от Нов български университет.

ИК е партньор в проекта „Създаване на висококвалифицирани специалисти по съвременни материали за опазване на околната среда: от дизайн до иновации“ BG051PO001-3.3.06-0050 по Оперативна програма „Развитие на човешките ресурси“, Европейски социален фонд. В проекта са включени всички млади учени, докторанти и пост докторанти. Основната цел на проекта е създаване на ново поколение специалисти в стратегически важна за икономиката на страната област „Съвременни материали за опазване на околната среда“ и допринася за подобряване на човешкия капитал чрез достъп до качествено образование. Придобитите от младите хора нови знания и умения ще разширят възможностите им за професионална реализация, съобразно изискванията на бизнеса, и активното им включване в новосъздаващите се технологични паркове. Осигурените международни научни контакти на младите хора ще допринесат за интегрирането им в Европейската научноизследователска общност.

6. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО И АНАЛИЗ НА НЕЙНАТА ЕФЕКТИВНОСТ

Съгласно класификацията на Центъра за иновации към БАН, основната част от разработките на ИК през 2014 г. са на различен етап от фаза IR – изследователска фаза.

Има заявен патент пред патентно бюро Abel Law Group, LLP, Аустин, Тексас „Никелови катализатори за горивни клетки“, Appl. No. 61/954,704 с разработващ колектив от ИК БАН с ръководител проф. дн С. Раковски и участници доц. д-р М. Габровска, гл. ас. д-р Д. Николова и спец. химик Л. Билярска и колеги от фирмата ГенСел.

В ИК съществува значителен брой иновационни научни продукти, готови за реализация при проявен интерес от страна на промишлените предприятия. Създадени са технологии за синтез на: високоефективни наноразмерни фотокатализатори на основата на титанов диоксид и технологии за дезинфекция и почистване на въздух, води и почви 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 уреди 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 сензори и технология за дозиметричен контрол на радиацията в хранителни продукти и живи организми с използване на

метода на ЕПР. Синтезирани са фото- и термо-чувствителни спиро-органични съединения, за използване като био-маркери, електронни комутатори и др.

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 е готов за реализация научен продукт:

„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. Също така, те могат да намерят приложение в медицината за дезинфекция и стерилизация на болнични стаи, операционни, затворени помещения, в селското стопанство, при съхранение на плодове и зеленчуци и др.

Фотокаталитично устройство за почистване на въздуха в затворени помещения.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО

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.

7. СЪСТОЯНИЕ И ПРОБЛЕМИ НА ЗВЕНТО В ИЗДАТЕЛСКАТА И ИНФОРМАЦИОННА ДЕЙНОСТ, ПРЕПОРЪКИ

Редица учени от института участват в редколегиите на следните специализирани списания:
проф. дн С. Раковски

- Bulgarian Chemical Communications
- Catalysis in Industry, Русия (
- Apple Academic Press – Toronto, New Jersey ,
- International Journal of Nanochemistry and Nanobiology,
- Herald of Volgograd State University Jour,
- Russian Journal of "Chemical Physics and Mesoscopy" ,
- Polymers Research Journal, USA ,
- проф. дн Ив. Митов
- Mössbauer Effect Reference and Data Journal

доц. д-р А. Елияс
Nanoscience and Nanotechnology

чл. кор. Л. Петров

- 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- Ч. Бонев

- Bulgarian Chemical Communications
- Химия и индустрия - зам. Главен редактор

Проф. дн Н. Йорданов

- Bulletin of the Chemists and Technologists of Macedonia
- Electronic Journal of Theoretical Physics

