



ЕВРОПЕЙСКИ СЪЮЗ
ЕВРОПЕЙСКИ ФОНД ЗА
РЕГИОНАЛНО РАЗВИТИЕ



ОПЕРАТИВНА ПРОГРАМА
**НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ ЗА
ИНТЕЛИГЕНТЕН РАСТЕЖ**

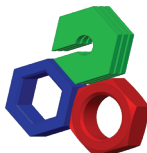
BG05M2OP001-1.001-0008
**НАЦИОНАЛЕН ЦЕНТЪР ПО МЕХАТРОНИКА
И ЧИСТИ ТЕХНОЛОГИИ**

СЕМИНАР

КАМПУС ГЕО МИЛЕВ
СЪВРЕМЕННА ИНФРАСТРУКТУРА
И
ИЗСЛЕДОВАТЕЛСКИ ВЪЗМОЖНОСТИ

29 юни 2022 г.

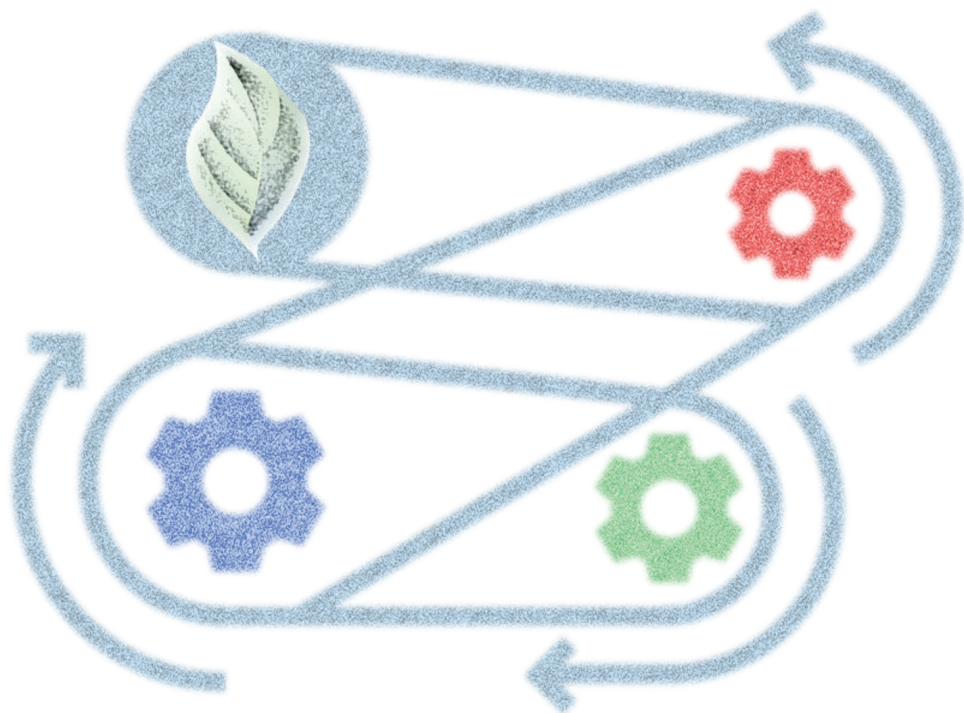
София



ЗАЕДНО СЪЗДАВАМЕ

ПРОГРАМА

- 12:30 – 13:00 *Регистриране на участниците и кафе*
- 13:00 – 13:15 *Откриване, проф. Пламен Стефанов, ръководител на кампус „Гео Милев“*
- 13:15 – 13:45 *Възможности на in situ и operando вибрационна спектроскопия за изучаване на адсорбционни и каталитични процеси, Константин Хаджииванов*
- 13:45 – 14:15 *Приложение на нанопорестите материали като катализатори и носители на лекарствени вещества, Маргарита Попова*
- 14:15 – 14:45 *Монокристален структурен анализ при променливи температури и налягания, Борис Шивачев*
- 14:45 – 15:15 *Комплекс за определяне на механични характеристики при статични и динамични изпитвания, Румен Кръстев*
- 15:15 – 15:45 *Теоретично и експериментално изследване на механизмите на водородно окрежкостяване при метални материали, Борис Яначков*
- 15:45 – 17:00 *Посещения на лаборатории*



ВЪЗМОЖНОСТИ НА IN SITU И OPERANDO ВИБРАЦИОННА СПЕКТРОСКОПИЯ ЗА ИЗУЧАВАНЕ НА АДСОРБЦИОННИ И КАТАЛИТИЧНИ ПРОЦЕСИ

Константин Хаджииванов, Михаил Михайлов, Кристина Чакърова, Елена Иванова, Никола Дренчев, Станислава Андонова и Димитър Панайотов

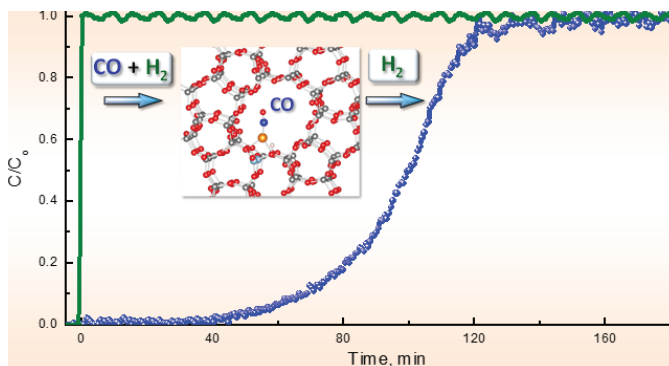
Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките

Основна предпоставка за успешно разработване на нови функционални материали е установяване на механизма на процеса, за който те ще се използват. В това отношение най-висок потенциал имат спектроскопските методи. В зависимост от начина на тяхното приложение те могат да се разделят на три вида: ex situ, in situ и operando.

Най-разпространени за първоначално охарактеризиране са ex-situ методите. В тези случаи материалите се изследват в неконтролирана или слабо контролирана среда. За изясняване на механизмите на процеси, които протичат на повърхността (адсорбция, катализ, сензорика), е необходимо средата да се контролира с оглед на отстраняване на предварително адсорбирани съединения, които не участват в реалните процеси. За тези цели се използва in situ спектроскопия.

Следващото ниво на спектроскопските изследвания е operando спектроскопията. Тя е методология, която позволява изследване на материалите в работни условия, например спектроскопско характеризиране на катализатор по време на реакцията едновременно с измерване на неговата каталитична активност и селективност. Този метод е мощно средство за детайлно изучаване на механизма на действие на адсорбенти и катализатори. Съществено е да се подчертае, че за успешно прилагане на operando спектроскопия е необходимо предварително да се получи детайлна информация от in situ изследвания.

В доклада са представени някои резултати от приложения на in situ и operando инфрачервена спектроскопия, получени в Института по обща и неорганична химия на БАН от участници в Националния център за върхови постижения по мехатроника и чисти технологии: (i) изучаване на т.нар. isotopic scrambling каталитична реакция между $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ и (ii) разработване на нов ефективен Cu/ZSM-5 адсорбент за фино почистване на водород от следови количества CO. Това е от особено значение за водорода, използван в горивните клетки, тъй като допустимата концентрация на CO е не повече от 10 ppm.

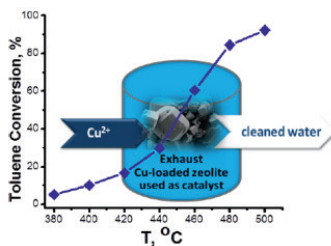


ПРИЛОЖЕНИЕ НА НАНОПОРЕСТИТЕ МАТЕРИАЛИ КАТО КАТАЛИЗАТОРИ И НОСИТЕЛИ НА ЛЕКАРСТВЕНИ ВЕЩЕСТВА

Маргарита Попова

*Институт по органична химия с Център по фитохимия,
Българска академия на науките*

Наноматериалите предоставят възможности за решаване на важни социално-значими проблеми, свързани с опазване на околната среда, намаляване на парниковите емисии, получаване на енергия и химикали от възобновяеми източници, както и разработване на иновативни лекарствени системи с потенциално приложение в диагностиката, превенцията и терапията на различни заболявания. Чрез използване на оригинални подходи за разработване на нови наноразмерни материали, включващи мезопорести силикати с различна структура и морфология на частиците, йерархични зеолити и наноразмерни метални оксиди с предварително зададени свойства могат да се получат нови наноматериали с приложение като катализатори за важни индустриални процеси и като носители на лекарствени вещества. Изчерпването на изкопаемите горива и екологичните проблеми, свързани с тяхното използване, ни насочват към търсене на нови алтернативни източници на енергия и ценни химически съединения. Отпадъчната биомаса е изключително атрактивен суровинен източник за получаване на химикали и биогорива, а създаването на устойчиви и безотпадни технологии за нейното оползотворяване би допринесло за повишаване на конкурентоспособността на производства, базирани на кръгова икономика. Важен етап в създаването на тези технологии е разработването на ефективни наноразмерни катализатори, които са в основата на „зелената“ химия. На основата на мезопорести силикати, зеолити и композитни материали с подходяща структура, функционалност и морфология на частиците могат да се получат нови лекарство-доставящи системи с модифицирано освобождаване, подобрена бионаличност и токсикологичен профил на противовъзпалителни и противотуморни лекарствени вещества.

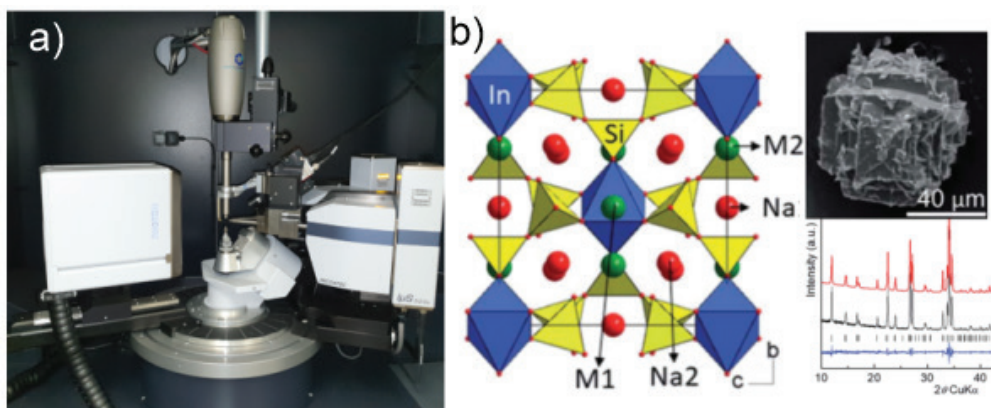


МОНОКРИСТАЛЕН СТРУКТУРЕН АНАЛИЗ ПРИ ПРОМЕНЛИВИ ТЕМПЕРАТУРИ И НАЛЯГАНИЯ

Борис Шивачев и Росица Николова

*Институт по минералогия и кристалография „Акад. Иван Костов“,
Българска академия на науките*

Във връзка с осъществяване на научни изследвания в кампус „Гео Милев“ на Центъра за върхови постижения по мехатроника и чисти технологии бе закупен *Монокристален дифрактометър D8 Venture* с два източника на лъчение (Cu 1.54 Å и Mo 0.71 Å), PhotonII детектор за shutterless събиране на данни, диамантена Bragg-(S) клетка за измервания при високи налягания до 90 GPa и Oxfordcryo 800 за контрол на температурата (-193 до +130°C). Приложенията на дифрактометъра включват определяне на структурата (структурна характеристика) на органични, неорганични, метал-органични и биологични монокристални образци. Изискването за размера на монокристалите е намалено, като при такива, съдържащи елементи с атомен номер след Al, монокристалите трябва да са с размери най-малко 10 x 10 x 10 µm, а при биологични и органични монокристали размерите да са над 100 µm.



Изображение на: **a)** гониометър, детектор и източници на лъчение на D8 Venture и **b)** определената структура в направление [100] на ново зеолитоподобно вещество MS-2¹.

1. RSC Advances, 2022, 12, 12531-12536

КОМПЛЕКС ЗА ОПРЕДЕЛЯНЕ НА МЕХАНИЧНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРИ СТАТИЧНИ И ДИНАМИЧНИ ИЗПИТВАНИЯ

Румен Кръстев

Институт по Механика, Българска академия на науките

Ще бъде представена информация за ZWICK/ ROELL HA-250 комплекса и за неговите възможности.

Съоръжението е сервохидравлично и има съвременна система за управление, като софтуерът съдържа много изпитвателни програми. Има приспособле-



ния за захващане на образци с резба, както и хидравлични захвати - подходящи за цилиндрични или плоски образци. Освен на опън, може да се правят изпитвания на натиск или на огъване.

Движението на буталото може да се управлява според измерената сила, преместването на буталото или според показанията на екстензометър. Цикличното натоварване може да бъде с триъгълна, трапецовидна или синусоидална форма. Има възможности за определяне на пукнатиноустойчивост. Комплексът разполага с температурна камера (-80°C до 250°C), както и с високотемпературна пещ, до 1000°C.

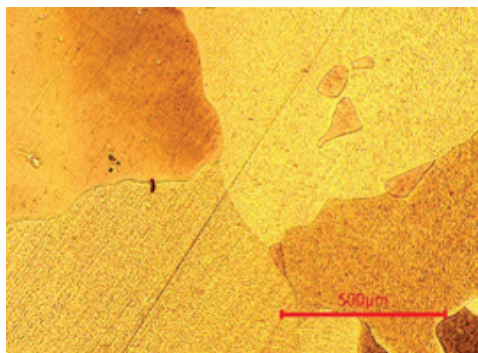
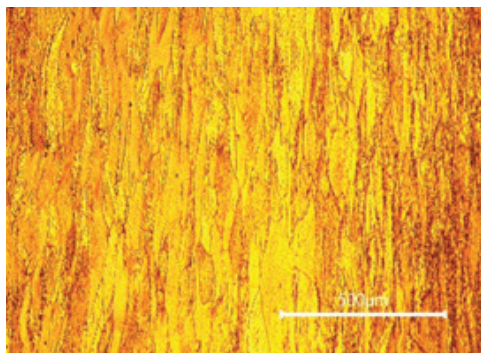
ТЕОРЕТИЧНО И ЕКСПЕРИМЕНТАЛНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА МЕХАНИЗМИТЕ НА ВОДОРОДНО ОКРЕХКОСТЯВАНЕ ПРИ МЕТАЛНИ МАТЕРИАЛИ

Борис Яначков, Красимир Колев, Людмил Лютов, Людмил Дренчев

*Институт по металознание, съоръжение и технологии
с Център по хидро- и аеродинамика, Българска Академия на Науките*

При фундаменталните изследвания в металознанието важна тема е въздействието на разтвореният водород върху свойствата на металите и сплавите. Повече от столетие е известно, че даже малки количества водород водят до формиране на пукнатини и деградация на металите. Механизмите на това явление, известно като водородно окрехкостяване, все още не са напълно изяснени. Огромната значимост на този проблем е мощен стимул за развитие на нови експериментални и теоретични методи, отчитащи квантовите ядрени ефекти, породени от малката маса на водорода.

В светлината на настъпващата ера, в която водородът ще е основен енергиен източник, значението на водородната тематика значително нараства. В



Института по металознание, съоръжение и технологии с Център по хидро- и аеродинамика има съществен напредък в експерименталните изследвания и компютърни симулации при изучаване на въздействието на водорода върху свойствата на металните сплави. В лекцията са представени получените

експериментални резултати, свързани със стимулираната рекристализация в желязни образци, тяхното наводородяване и повишена мобилност на дислокациите, предизвикана от наличието на водород в кристалната решетка. Анализирани са структурните особености и механичното поведение на образците с повишено съдържание на водород при циклични релаксационни процеси. Експерименталните резултати са сравнени с резултатите от теоретичните пресмятания.

Успехите от изследванията в тази перспективна област и установените научни контакти в чужбина ни позволяват да привлечем амбициозни млади учени, като им предоставим чудесни възможности за кариерно развитие, а също и да изградим научен и експертен потенциал.

BG05M2OP001-1.001-0008

Национален център по мехатроника и чисти технологии

www.cemct.eu

КАМПУС ГЕО МИЛЕВ БАН



www.eufunds.bg