



## Информация за финансиран проект

<b>Наименование на конкурса:</b>
Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2018 г.
<b>Основна научна област или обществен приоритет:</b>
Химически науки
<b>Входящ № на проект:</b>
H29/13
<b>Заглавие на проекта:</b>
Формиране и еволюция на металната фаза в нанесени Co-Pd катализатори за хидрогенирането на CO. Изследване на връзката между съотношението на адсорбция CO/H и селективността
<b>Базова организация:</b>
Институт по катализ – Българска академия на науките
<b>Партньорски организации:</b>
<b>Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):</b>
Доцент д-р Мая Георгиева Шопска
<b>Общ размер на отпуснатото финансиране:</b>
110 000 лева
<b>Разпределение на сумата по проекта между базовата организация и партньорите</b>
<b>Организация:</b> Институт по катализ – Българска академия на науките
Сума: 110 000 лева
<b>Организация:</b>
Сума:
<b>Организация:</b>
Сума:
<b>Организация:</b>
Сума:



**Резюме на проекта:**

Металните катализатори на основа Co и Pd са активни в реакцията на хидрогениране на CO. Съотношението CO/H<sub>2</sub> в използвания синтез-газ определя главния продукт, чиято стехиометрия на получаване съответства на зададената в газовата смес. Co катализатори могат да бъдат експлоатирани при внимателно подбрани реакционни температури и съотношение CO/H<sub>2</sub> в използвания синтез-газ, тъй като работят добре в синтез-газ богат на H<sub>2</sub> (минимално изискуемата стойност е 0.47). Съотношението CO/H<sub>2</sub> в синтез-газа обуславя протичането на химични реакции до стехиометрично възможни продукти, но как ще се реализира взаимодействието на реагентите, а оттам и каква ще е селективността на използвания катализатор зависи от съотношението на адсорбция CO/H върху повърхността. Съществено влияние оказва присъствието на Pd и състоянието на повърхността на металният компонент на катализатора. Изчисления и анализи свързани със стехиометрията на адсорбция CO/H са правени за нанесени на оксидни носители Co катализатори. Отношението CO/H варира в широки граници (между 0.8 и 15.7) и намалява при нарастване на концентрацията на нанесения Co, степента на редукция, както и с намаление дисперсността на метала. Измененията в съотношението на адсорбция се отдават на вариране на дяловете на мостово, линейно и поликарбонилно свързани адсорбирани молекули CO. Информацията по разглежданата тема в литературата е недостатъчна въпреки значителния брой научни изследвания свързани с Co-Pd катализатори за хидрирогениране на CO. Правени са предложения за обвързване на стойностите на отношението CO/H с форми на адсорбция на CO върху повърхността на металните компоненти в катализатора и селективността по въглеродороди, съдържащи различен брой C атоми във веригата. Изследванията с ИЧС могат да дадат богата информация, но досега са били ограничени предимно до идентификация на адсорбционни форми в статични условия и по-рядко в реакционни условия като в незадоволителна степен са комбинирани с други методи за изследване на повърхността на този тип биметални катализатори. Системно изучаване на възникването и вида адсорбционни форми на CO, превръщането им една в друга, преразпределението на дяловете на отделните видове при коадсорбция с водород, при изменение на реакционните условия и зависимостта от начина на формиране на металната повърхност не е осъществявано и анализирано в необходимата степен. Цели на проекта са изследване с метода на „ин ситу“ дифузно-отражателна ИЧС на последователността на възникване на адсорбционните форми на CO, преразпределението и изчерпването им в хода на каталитичния процес, и съпоставяне на резултатите от спектроскопските изследвания с тези от други методи свързани с предисторията на формиране на катализатора, и със съотношението на адсорбция CO/H, за да се изясни възможността то да се използва като показател за предвиждане на селективността.



## Членове на научния колектив

<i>Организации/участници<sup>1</sup></i>	<i>Бележка<sup>2</sup></i>
<b>Базова организация:</b>	
Институт по катализ – Българска академия на науките	
<b>Ръководител на научния колектив</b>	
Доцент д-р Мая Георгиева Шопска	
<b>Участници:</b>	
Доцент д-р Силвия Живова Тодорова Доцент д-р Христо Господинов Колев Главен асистент д-р Катерина Иванова Алексиева Химик Искра Живкова Щерева Химик Иванка Георгиева Иванова Консултант: Доцент д-р Красимир Константинов Тенчев	СТ ПН
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	

<sup>1</sup> Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник

<sup>2</sup> Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), пенсионер (ПН) или учен от чужбина (УЧ) и съответната бройка.



Общ брой **млад учен (МУ)** .....

Общ брой **постдокторант (ПД)** .....

Общ брой **докторанти (ДО)** .....

Общ брой **студенти (СТ) – 1 (един)**.