

## Информация за финансиран на проект

<b>Наименование на конкурса:</b>
Конкурс по Национална научна програма „ВИХРЕН – 2021”
<b>Основна научна област:</b>
Химия (физически науки и инженерство)
<b>№ на договор:</b>
КП-06-ДВ-1
<b>Начална дата на проекта и срок на договора:</b>
01.05.2021 г.
<b>Заглавие на проекта:</b>
Идентифициране на повърхностни структури от тип АВ <sub>n</sub> посредством усъвършенствано изотопно маркиране
<b>Базова организация:</b>
Институт по обща и неорганична химия – БАН
<b>Партньорски организации:</b>
<b>Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):</b>
акад. проф. дхн Константин Хаджииванов
<b>Общ размер на договореното финансиране:</b>
1 325 000 лв.

**Резюме на проекта (до 1 стр. в рамките на полето по-долу):**

Повърхностните явления са в основата на такива технологично важни процеси като адсорбция и катализ. Комплексите на повърхността могат да имат различна структура и състав и често се образуват структури от тип  $AV_n$ . Те могат да бъдат разделени на два вида: (i) близначни съединения, образувани чрез адсорбция, където А е център от повърхността и В е лиганд, и (ii) повърхностни структури, в които атомът А е гост; типични примери са повърхностни оксо-аниони като нитрати и карбонати.

Идентифицирането на повърхностните  $AV_n$  комплекси и определянето на тяхната структура са изключително важни задачи. Така например, образуването на близначни комплекси по време на адсорбция води до значително увеличаване на адсорбционния капацитет и улеснява взаимодействието между две адсорбирани молекули. Повърхностни аниони с различни структури могат да се различават драстично по химични свойства, включително реактивност.

Вибрационната спектроскопия, включваща изотопно белязани молекули, е ключов метод за установяване на структурата на  $AV_n$  повърхностни съединения. Той е относително добре развит за прости системи, напр. дикарбонили, но остава практически неизследван за по-сложни системи. Повърхностните оксо-аниони в момента се описват доста схематично и има само инцидентни изотопни изследвания, насочени към установяване на тяхната структура. Следователно е необходимо да се разработят нови подходи, които ще позволят недвусмислено определяне на структурата на видовете  $AV_n$  в по-сложни случаи.

Целта на настоящия проект е да се разработи и приложи методология, базирана на вибрационна спектроскопия на изотопно белязани съединения и паралелни изследвания с метода на функционала на плътността, за недвусмислено установяване на структурата на повърхностните съединения от тип  $AV_n$ . Реализацията на проекта ще подобри значително познанията ни за близначните съединения и анионните структури на повърхността. Това ще окаже въздействие не само върху научните общности от областта на химията и физиката, но и извън тях.

## Членове на научния колектив

Организации/участници <sup>1</sup>	Бележка <sup>2</sup>
<b>Базова организация:</b>	
Институт по обща и неорганична химия – БАН	
<b>Ръководител на научния колектив</b>	
акад. проф. дхн Константин Хаджииванов	
<b>Участници:</b>	
<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 като включите и участниците, които са работили по проекта не през целия период за изпълнение на проекта

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