

**СТАНОВИЩЕ**  
**върху дисертационния труд на**  
**Велина Колева Маркова**  
**за присъждане на образователната и научна степен „Доктор” по**  
**професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) на**  
**тема „Теоретично изследване на реакционни интермедиати, образувани при**  
**каталитично хидрогениране на етен върху родиеви кълъстери, отложени в**  
**зеолит”**

**от проф. дхн Тодор Минков Дудев,**  
**Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски”**

Дисертационният труд на Велина Маркова е оформен в рамките на 148 стандартни страници като включва 27 таблици и 58 фигури. Цитирани са 189 литературни източника. Основните резултати от научното изследване са включени в две публикации, отпечатани в международни списания с висок импакт фактор: Catal. Sci. Technol. (IF = 5.426) и J. Phys. Chem. C (IF = 4.772). Части от дисертацията са докладвани на 3 национални конференции и семинари.

Използвайки квантово-химични методи докторант Маркова е моделирала зеолитни системи, съдържащи родиеви кълъстери с различен размер и геометрия, и е изследвала процесите на каталитично хидрогениране на етен върху твърдия катализатор. Въпреки засиления интерес към свойствата на метални катализатори от групата на платината по отношение на реакции на хидрогениране/дехидрогениране на въглеводородни системи, изследвания върху потенциалното приложение на родиеви катализатори при химическите трансформации на газообразни въглеводороди са рядкост в литературата. Така изследванията на докторант Маркова запълват една важна ниша от научното дирене в тази област и дават отговор на редица въпроси от теоретичен и практически интерес: (1) Каква е структурата и стабилността на хидрогенирани родиеви кълъстери, внедрени в порите на зеолитна решетка от тип фожазит? (2)

Какво е количеството водород, адсорбиран върху родиевите клъстери, в зависимост от температурата и налягането на водорода? (3) Каква е структурата и относителната стабилност на различни органични интермедиати, получени в резултат на каталитичното превръщане на етена върху родиевите клъстери? (4) Какви са основните физико-химични и структурни детерминанти на каталитичния процес с участието на родиеви клъстери?

Имам следните въпроси към докторанта: (1) В хода на работата, правени ли са опити за локализиране на преходни състояния и проследяване на реакционния път на каталитичния процес? (2) В каква степен родиевите клъстери се отличават по своите каталитични свойства (механизъм на каталитичната реакция, предпочетени интермедиати) от платинови, паладиеви и иридиеви такива с подобен размер?

**Заклучение:** Дисертационният труд на докторант Велина Маркова решава актуални проблеми от областта на хетерогенния катализ. Работата прави отлично впечатление. Написана е много ясно и увлекателно, с вещина и много добро познаване на изследваната материя. Докторантът е овладял до съвършенство и умело приложил съвременни изчислителни подходи при решаване на поставените нетривиални задачи. Изчисленията са надеждно калибрирани спрямо налични експериментални данни. Постигнати са убедителни резултати, които могат да се отнесат към категорията новости в научното дирене. Хвърлят нова светлина върху процесите, които протичат при каталитичното хидрогениране на етен върху родиеви клъстери. Дават солидна основа за по-нататъшни термодинамични и кинетични изследвания в дадената област, както и за дизайна на нови метални катализатори със зададени свойства.

Авторефератът правилно отразява в синтезиран вид основните резултати и заключения на дисертационния труд.

Дисертацията на докторант Велина Маркова отговаря по обем и качество на Закона за развитие на академичния състав в Република България и Правилника за прилагане на ЗРАСРБ в Софийския университет „Св. Кл. Охридски“. Изложеното по-горе ми дава основание да дам много висока оценка на дисертационния труд и убедено да предложа на почитаемото научно жури да присъди на Велина Маркова

образователната и научна степен „Доктор” в професионално направление 4.2.  
Химически науки (Теоретична химия).

София, 18.XII.2015 г.

Подпис:

(проф. дхн Тодор Дудев)