

Становище

относно дисертация на тема:

„Теоретично изследване на реакционни интермедиати, образувани при каталитично хидрогениране на етен върху родиеви кълъстери, отложени в зеолит“,

представена от докторант Велина Колева Маркова за присъждане на образователната и научна степен „доктор”, Професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия), Научен ръководител: проф. дхн Георги Вайсиров

Член на научно жури: проф. д-р Наташа Средкова Трендафилова

Изследванията в дисертационната работа на Велина Колева Маркова са посветени на теоретичното изучаване на интермедиати, образувани в процеса на каталитичното хидрогениране на етен върху родиеви кълъстери, отложени в зеолит. Обект на конкретен научен интерес в дисертацията са характеристики, които са от значение за каталитичната активност и селективност: стабилност и структура на родиевите кълъстери и интермедиати, електронна плътност и вибрационни свойства. Металните кълъстери отложени върху зеолити удовлетворяват изискванията за висока каталитична активност и ниска цена и са катализатори с нарастващо значение за индустрията. Многобройните публикации по темата през последните години, както и конкретните практически приложения на металните кълъстери, определят изследванията в дисертационния труд не само като актуални, но и твърде перспективни в бъдеще време.

С помощта на съвременни изчислителни методи е моделирана дисоциативната адсорбция на водород върху Rh_n ($n = 3, 4$) кълъстери, отложени в зеолитна решетка от тип фожазит. Обсъдени са промените в структурата и стабилността на получените комплекси, както и в разпределението на електронната плътност и честотите на вибрационните трептения ($Rh-H$ и $Rh-Rh$), при нарастване на количеството водород в системата. Чрез моделни изчисления са предсказани структурата и стабилността на интермедиати, които могат да се формират при хидрогениране (етил), дехидрогениране (етилидин, винил, винилиден) или изомеризация (етилиден) на етен, при адсорбция на молекулата върху малки хидрогенирани родиеви кълъстери. На основата на получените теоретични данни е предложен термодинамичен модел, с който са предсказани доминантните органични лиганди върху двата размера кълъстери, в зависимост от температурата и налягането на водорода. Резултатите са от съществено значение за теорията, тъй като са получени от първи принципи и помагат за разкриване на механизмите на процесите с участието на металните кълъстери. Те са от съществено значение и за експеримента, тъй като са показали, че кълъстерите Rh_4 позволяват формирането на интермедиат, водещ до хидрогениране на етен, докато върху по-малкия кълъстер, Rh_3 , се образува стабилен комплекс с етилидин, който блокира каталитичната реакция.

По обем и изчерпателност, проведените изследвания отговарят на всички изисквания за дисертационна работа. Те са проведени на високо научно ниво, с подходящи съвременни методи и представят докторантката Велина Маркова като много добре подготвен по темата специалист, с изградени изследователски умения за провеждане на теоретични изследвания. Изводите в дисертацията кореспондират с поставените цели и задачи. Те имат фундаментално значение за областта и ще могат да се използват като добра база при бъдещи изследвания на тези и сходни системи.

Дисертацията е написана на много добър академичен стил и съдържа всички необходими глави. Литературният обзор, включващ 189 източника, отразява коректно съвременното състояние на научния проблем и прави изчерпателен преглед на теоретичните изследвания и изчислителни схеми, използвани за теоретичното охарактеризиране на метални кълъстери. Целта на изследванията и конкретните научни задачи са ясно дефинирани, а използваните изчислителни методи са представени с разбиране, стегнато и достатъчно изчерпателно. Получените резултати са описани в добра последователност в Глава 5: „Резултати и обсъждане”, като последните са подходящо илюстрирани с достатъчно на брой информативни фигури и таблици. Авторефератът отразява коректно и пълно съдържанието на дисертацията.

Резултатите от изследванията на докторантката по темата са публикувани в две научни публикации с висок импакт фактор: една в *Catalysis Science and Technology* (ИФ 5.426) и една в *Journal of Physical Chemistry C* (ИФ 4.772). Представена е една публикация в *Biomacromolecules* (5.750), която не е включена в дисертационния труд. Докторантката е представила част от своите резултати на три научни форума.

Всички представени документи във връзка с процедурата отговарят на изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за неговото прилагане и Препоръчителните изисквания за получаване на научни степени в СУ „Св. Кл. Охридски”.

Казаното до тук ме мотивира без колебание да дам своята положителна оценка на дисертационния труд и да подкрепя присъждането на образователната и научна степен „доктор” на **Велина Колева Маркова**.

07.12.2015

София

Проф. д-р Наташа Трендафилова