

СТАНОВИЩЕ

върху дисертация на тема

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

на **Велина Колева Маркова**

редовен докторант в катедра Органична химия и фармакогнозия, Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски”

за присъждане на образователната и научна степен „доктор” по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия)

от проф. дхн Георги Николов Вайсилов, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски” (научен ръководител на докторанта)

Велина Маркова е завършила Химическия факултет на СУ (сега Факултет по Химия и Фармация) като бакалавър в специалност Компютърна химия през 2010 г., след което е завършила магистратура „Изчислителна химия” в същия факултет. Дипломната си работа за магистратура г-ца Маркова е подготвила под ръководството на проф. Цонка Минева от Института Шарл Жерар в Монпелие, Франция. От 2011 до 2015 г. тя е редовен докторант във Факултета по Химия и Фармация.

Дисертацията на Велина Маркова е посветена на теоретично изследване на взаимодействието на водород и етен с малки родиеви кълъстери в порите на зеолит с помощта на периодични квантово-химични методи. Изследването е свързано с изясняването на процесите на селективно каталитично хидрогениране на етен върху такива каталитични системи.

В първата част от изследванията, включени в дисертационния труд, е моделирана дисоциативна адсорбция на водород върху малки родиеви кълъстери, отложени в порите на зеолит. На основа на получените резултати е установено покритието на кълъстера с водород в зависимост от температурата, налягането на водорода и размера на кълъстера. Във втората част е изследвано влиянието на водородното покритие и размера на родиевите кълъстери върху стабилността на различни органични лиганди върху тях, които модат да бъдат получени от етен. На основа на теоретичните изчисления са определени доминантните типове органични лиганди върху различните кълъстери. Получените резултати са от съществено значение

за експерименталните изследвания, тъй като показват кои от моделираните кълъстери са вероятни каталитични центрове за процеса на хидрогениране на етен и кои благоприятстват формирането на стабилни комплекси, блокиращи процеса.

Като научен ръководител на дисертанта ще отбележа моите отлични впечатления от работата на Велина Маркова. По време на работата по дисертацията тя усвояваше и прилагаше нови теоретични методи и подходи, използваше успешно различни квантово-химични програмни пакети, анализираше проблемите и намираще пътища за тяхното решаване. По време на докторантурата си г-ца Маркова работи и по други интересни научни проблеми, които обогатиха познанията и. Едновременно с това, тя води упражненията и ръководи подготовката на курсови работи за курсовете по Приложна квантова химия за студенти от специалност Компютърна химия и Хибридни методи за студенти от магистърската специалност Изчислителна химия.

Велина Маркова е представила резултатите от научните си изследвания, включени в дисертацията, в три научни съобщения на научни прояви с международно участие. През последните няколко години тя взе активно участие в подготовката на ежегодните Национални конференции по Химия за студенти и докторанти.

Дисертационният труд на Велина Маркова съдържа научни и научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и показва, че кандидатът притежава задълбочени знания по теоретична химия и способност за самостоятелна научна работа. Резултатите от изследванията са публикувани в две статии в специализирани научни списания, реферирани в ISI Web of Knowledge, *Journal of Physical Chemistry C* (2015 г., IF 4.7) и *Catalysis Science and Technology* (приета за печат през 2015 г., IF 5.4), което удовлетворява препоръчителните изисквания на ФХФ.

Намирам, че дисертационният труд на Велина Колева Маркова напълно съответства на изискванията на Закона за развитие на академичния състав, правилниците за неговото прилагане и на препоръчителните изисквания на ФХФ, и предлагам на Почитаемото научно жури да и присъди образователната и научна степен „доктор” по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).

16.12.2015 г., Хулиака

/проф. дхн Георги Вайсилов/