

СТАНОВИЩЕ

върху дисертация на тема „*Квантово-химично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид*“

на **Искра Зарева Колева**

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

за присъждане на научната и образователна степен „Доктор“

от проф. дхн Георги Николов Вайсилов, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“ (един от научните ръководители на докторанта)

Искра Колева е завършила Факултета по Химия и Фармация на Софийския университет като бакалавър, след което през 2013 г. е завършила магистратура в същия факултет. От 2014 до 2017 г. тя е докторант в катедра Органична химия и фармакогнозия на факултета под мое ръководство и ръководството на доц. Християн Александров.

Дисертацията на Искра Колева е посветена на теоретично моделиране на различни каталитични системи на основата на цериев диоксид с помощта на съвременни квантово-механични методи.

Първата част от изследването включва каталитични системи, при които цериев диоксид е отложен върху алуминиев оксид, а в част от тях е добавен родий. Целта на изследването е свързана с изясняване на резултати от предходни експериментални изследвания, проведени в парньорската група на проф. Букховен от ЕТХ Цюрих. Моделните изследвания на Искра Колева позволиха да бъде установен начина на взаимодействие между двата оксида и да се покажат възможностите компоненти от цериевия диоксид да са разположени в кухини на алуминиевия оксид. За осъществяване на моделирането, тя конструира модели на различни повърхности на гама-алуминиев оксид. В рамките на изследването беше показано, че експериментално установената спонтанна редукция на част от цериевите йони се дължи на наличие на малки клъстери на повърхността на носителя, а не на експерименталното предположение, че редукцията се дължи на йони, включени в кухините на носителя.

Втората част от изследванията са насочени към изясняване на динамичните промени в системи, при които платинови частици са отложени върху цериев или алуминиев оксиди. Изследването показва, че в присъствие на въглероден оксид в каталитичните системи протичат различни процеси в зависимост от типа и

структурата на носителя. Върху наноструктуриран цериев диоксид платиновите частици се разпадат на дикарбонилни платинови комплекси, върху повърхност на цериев диоксид платиновите кълстери са в равновесие с монокарбонилни платинови комплекси, а върху алуминиев оксид платиновите кълстери не се разпадат.

Като научен ръководител на дисертанта ще отбележа моите отлични впечатления от работата на Искра Колева. По време на работата си, тя прояви способност бързо да усвоява и прилага най-сложни нови теоретични методи и подходи, да използва успешно различни квантово-химични програмни пакети, да анализира проблемите и да търси пътища за тяхното решаване. Искам да обърна внимание на задълбочения анализ на промените в структурата на носителя – алуминиев диоксид, след отлагане на цериев диоксид върху повърхността на носителя или включването на цериеви йони в подповърхностни кухини.

Искра Колева е представила резултатите от научните си изследвания в пет доклада на национални научни прояви, част от които с международно участие. Като част от групата тя активно участва в срещи и школа в рамките на акция „Редуцируеми оксиди“ по програмата КОСТ. През последните няколко години тя взе активно участие в подготовката на ежегодните Национални конференции по Химия за студенти и докторанти.

Дисертационният труд съдържа научни или научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и показва, че кандидатът притежава задълбочени теоретични знания по теоретична химия и способности за самостоятелни научни изследвания. В съгласие с препоръчителните изисквания на ФХФ, резултатите от изследванията са публикувани в две статии в специализирани научни списания, реферирани в ISI Web of Knowledge, *Catal. Sci. Technol.* (ИФ 5.287) и *Phys.Chem. Chem. Phys.* (ИФ 4.449). Тя е съавтор и на трета публикация, в *J. Agric. Food Chem.*, която не е включена в дисертационния труд.

Смятам, че дисертационният труд на Искра Зарева Колева напълно съответства на изискванията и предлагам на Почитаемото научно жури да ѝ присъди научната и образователната степен „доктор“ по научно направление „Химически науки“.

10.03.2017 г.

/проф. дхн Георги Вайсиллов/