

## СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Татяна Табакова, Институт по катализ - БАН

относно дисертационен труд на тема: ”Квантово-химично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид” за присъждане на образователната и научна степен “доктор” по Професионално направление 4.2 – Химически науки (Теоретична химия) на докторант Искра Зарева Колева

Научни ръководители: проф. дхн Георги Вайсилев  
доц. д-р Християн Александров

Успешният дизайн на ефективни каталитични материали се основава на комбинирани теоретични и експериментални изследвания. Познаването на природата на активните центрове за определена каталитична реакция е една от предпоставките за постигане на тази цел. Дисертационният труд на Искра Колева представлява значим и актуален принос в тази насока, тъй като е посветен на квантово-химично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид. Поради специфичните физико-химични и окислително-редукционни свойства, тези системи са много атрактивни през последните години. Дисертацията е написана на добър професионален език, технически е много старателно и прецизно оформена и включва увод, литературен обзор, описание на изчислителния метод, резултати и дискусия, изводи, цитирана литература. Съдържа 125 страници, в които са включени 19 таблици. Илюстрирана е с 53 фигури, които допринасят за нагледно възприемане на резултатите. Цитирани са 121 литературни източника, като значителна част от тях са от последните 10-15 години, в т.ч. и от 2016 г., което е ясен показател за познаване на актуалното състояние на разглеждания проблем.

В литературния обзор е направена творческа оценка на литературния материал. Докторантката демонстрира висока научна осведоменост и способност да борава успешно с научната литература. Описани са структурните характеристики на цериевия диоксид и най-често прилаганите експериментални методи за охарактеризирането му. Разгледани са процесите, протичащи върху най-стабилната и често използвана цериево-диоксидна повърхност (111) и върху наночастици от  $\text{CeO}_2$ . Анализирани са различни модели на системата  $\text{Pt/CeO}_2$ , включващи както адсорбция на  $\text{CO}$  и кислород, така и механизмите на окисление на  $\text{CO}$  върху металната повърхност. Литературният обзор включва за сравнение описание на свойствата и моделиране на процеси върху друг често използван носител в хетерогенния катализ – гама-алуминиевия оксид, на смесени оксидни системи, съдържащи цериев диоксид и гама-алуминиев оксид. Направен е преглед и на моделни изследвания на платинови клъстери, нанесени върху  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и на процесите на окисление на  $\text{CO}$  върху тях.

Изчерпателният и аналитичен литературен обзор са послужили на докторантката да формулира целта на дисертационния труд, като е обосновано използването на надежден изчислителен подход.

Описанието на резултатите от детайлното квантово-химично моделиране на различни структури и протичащите върху тях процеси, както и тяхната интерпретация показват, че докторантката притежава не само задълбочени теоретични познания, но и значителен практически опит в областта на изчислителната квантова химия. Проведени са

впечатляващи по обем квантово-химични изчисления, на базата на които са направени изводи за влиянието на концентрацията на CO върху разлагането на платиновия клъстер върху подходящо избраните три типа носители: CeO<sub>2</sub>(111) повърхност, частица CeO<sub>2</sub> и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(001) повърхност, изследвана е структурата и стабилността на цериево-диоксидни частици, отложени върху повърхността или включени в обема на  $\gamma$ - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, анализирани са теоретични модели на смесените системи CeO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и Rh/CeO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Обобщенията в края на всяка от двете глави и изводите отразяват коректно научните приноси на дисертационния труд. Тяхната оригиналност и значимост се изразява в новите знания, свързани с изясняване природата на активните центрове в изследваните системи, като е обърнато внимание и на динамичните промени в тяхната морфология и окислително състояние в резултат на измененията на реакционните условия в екологично значими каталитични процеси.

Авторефератът е оформен с голяма прецизност и отразява обективно резултатите от изследванията.

Информацията за публикационната дейност на докторантката и участието в 5 научни форума с изнесени 4 устни и 1 постерен доклад са още едно доказателство за високото научно ниво на изследванията. Резултати, получени при изработване на дисертацията са отразени в 2 научни труда, публикувани в престижни списания с висок импакт фактор - *Catalysis Science & Technology* (IF = 5.287) и *Physical Chemistry Chemical Physics* (IF = 4.449) на издателство Royal Society of Chemistry. Докторант Искра Колева е първи автор и в двете публикации, което е индикативно за значителния ѝ личен принос в проведените изследвания. До момента е забелязан 1 цитат, което е обяснимо, имайки предвид краткия период след публикуване на резултатите.

Запознаването с дисертационния труд разкрива по безспорен начин активното участие на докторантката в извършване на изчисленията и в описанието и анализа на получените резултати. Приложените документи са свидетелство за израстването на Искра Колева от отличен студент (успех 6.00 от дипломите за степен „бакалавър“ и „магистър“) в млад учен с висока научна компетентност, с умения творчески да анализира и обобщава получените резултати от компютърното моделиране на базата на теория на функционала на плътността с цел изясняване на природата, структурата и поведението на изследваните каталитични системи. Придобитите опит и знания са плод и на работата ѝ в група с традиционно високо ниво на научните изследвания.

**В заключение** считам, че по актуалност, обем и ниво на изследванията, задълбоченост на дискусиата, значимост на научните приноси и наукометрични показатели, представеният дисертационен труд напълно отговаря на препоръчителните критерии за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ в Химическия факултет на СУ. Поради това, убедено давам своята **положителна** оценка на постигнатите в дисертационния труд резултати и предлагам на научното жури да присъди на Искра Зарева Колева образователната и научна степен „доктор“ по професионално направление 4.2. „Химически науки“ (Теоретична химия).

31.03.2017 г.

Изготвил становището:

/проф. д-р Татяна Табакова/