

СТАНОВИЩЕ

върху дисертационния труд на Искра Зарева Колева
за присъждане на образователната и научна степен „Доктор” по професионално
направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) на тема „ Квантово-химично
моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид”

от доц. д-р Галя Костова Маджарова

Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски”

Дисертационният труд на Искра Колева съдържа 125 страници, като включва 20 таблици и 55 фигури. Цитирани са 121 литературни източника. Резултати от проведените изследвания са публикувани в две статии в международни списания с висок импакт фактор: Catal. Sci. Technol. (IF = 5.287) и Phys. Chem. Chem. Phys. (IF = 4.449), като за втората публикация вече е забелязан един цитат. Части от резултатите в дисертацията са докладвани на 5 международни и национални конференции и семинари.

Проведените изследвания в дисертационния труд са в областта на изчислителния хетерогенен катализ. С помощта на методите на квантовата химия е анализирано влиянието на концентрацията на CO върху процеса на разпадане на Pt клъстери отложени върху редуцируем CeO₂ или нередуцируем γ -Al₂O₃ оксид. Проследено е и влиянието на структурата на подложката, като моделирането е извършено както за 2D повърхности, така и за наночастица от CeO₂. Във втората част на дисертацията е изследван механизмът на формиране на Ce³⁺ катиони при катализатори CeO₂/ γ -Al₂O₃ и Rh/CeO₂/ γ -Al₂O₃.

Дисертационният труд на докторант Искра Колева предлага обяснение на молекулно ниво на проблеми от областта на хетерогенния катализ, които могат да се разглеждат като научни резултати, които представляват оригинален принос в науката. (1) Изяснени са активните каталитични центрове в зависимост от концентрацията на CO, вида и структурата на носителя. (2) Дадено е обяснение на експериментално наблюдавани явления и е предложен механизъм на действие на изследваните каталитични системи.

Доказателство за актуалността на изследваните въпроси е вече забелязаният цитат на една от публикуваните работи.

Дисертацията е написана ясно и личи задълбочено познаване на изследваната материя. Извършеното изследване е внушително по обем. Докторант Колева е овладяла и умело прилага техниките на изчислителната химия. Анализът на резултатите е изчерпателен, а направените изводи са полезни за дизайна на нови и модифицирането на съществуващи ефективни катализатори.

Във връзка с представените резултати имам следната техническа забележка: никъде в дисертацията не е посочено, че всички проведени изчисления са само за Γ точката. Този протокол е напълно адекватен с оглед големината на елементарната клетка и един въпрос: защо големината на отложения платинов клъстер върху [111] повърхността на CeO_2 е 10 атома (и 9 CO молекули), а при моделирането на отлагането на Pt върху $\text{Ce}_{21}\text{O}_{42}$ наночастица клъстерът е 8 атома (7 и 12 CO молекули)?

Заклучение:

Дисертационният труд на Искра Колева показва, че кандидатът притежава задълбочени знания в областта на теоретичната химия и способности за самостоятелни научни изследвания.

Авторефератът правилно отразява основните резултати и заключения на дисертационния труд.

Дисертацията на докторант Искра Колева 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 без колебание положителна оценка на дисертационния труд и убедено да предложа на почитаемото научно жури да присъди на Искра Зарева Колева образователната и научна степен „доктор“ в професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).

София, 31.III.2017 г.

Подпис:

(доц. д-р Галя Маджарова)