

СТАНОВИЩЕ

за дисертационния труд на тема

„Изследване на възможностите за контрол на дизайна на нанесени върху порести носители метал/металооксидни катализатори за разлагане на метанол като възможност за използването му като носител на водород”

на инж. Изабела Георгиева Генова от ИОХЦФ-БАН

от доц. д-р Александър Елияс, Институт по катализ - БАН

Дисертационният труд, представен за придобиване на научна и образователната степен „ДОКТОР” е по професионално направление 4.2. Химически науки (научна специалност „Нефтохимия и нефтохимичен синтез“). Той ми беше предоставен за становище като специалист по катализ предвид на своята тематична насоченост в областта на катализа. Докторантката е била зачислена на 01.06.2015 г. като докторант на самостоятелна подготовка и е била отчислена с право на защита по решение на Научния съвет от 14.06.2016 г. като са спазени всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в ИОХЦФ-БАН, който ни беше предоставен на разположение.

Веднага трябва да посоча на първо място актуалността на проблема за получаване на водородно гориво, предвид на предстоящото формиране на центровете за върхови постижения и по-конкретно „Центъра по мехатроника и авангардни технологии за чист свят”, който включва технологии за получаване на водород за горивните елементи на електромобилите.

На второ място бих посочил огромната по обем извършена експериментална работа (263 страници дисертационен труд, включващ 87 фигури, 5 схеми и 25 таблици) с привличането на цял комплекс от физикохимични методи на анализ. Това изисква значителни познания от страна на дисертантката, както в областта на синтеза (в конкретния случай синтез на мезопорести силикати), така и в областта на кинетиката на каталитичните реакции и физичните методи за охарактеризиране на получените катализаторни

образци. Обучението на такъв разностранен специалист изисква доста време, но същевременно такъв специалист би бил много полезен и ценен в Центъра по мехатроника или друг Център за върхови постижения или Център по компетентност след защитата на дисертационния си труд.

Впечатляващо е установяване на механизма на разлагане на метанол в такива подробности – това постижение има не само приложен аспект, но то има съвсем определено и фундаментално значение.

Обекти на изследването в дисертацията са мед-модифицирани K1T-6 и SBA-15 мезопорести силикати при което е постигнато регулиране на състоянието на нанесената върху тях медна/меднооксидна фаза чрез препаративния метод, а също и чрез поровата структура.

Може да обобщим накратко изследователската работа по формулираните в дисертацията цели и произтичащите от тях конкретни изследователски задачи като една последователност от синтез на катализаторни образци, сравняване на тяхната каталитична активност в реакцията на разлагане на метанол и намиране на обяснение за разликите в тяхната активност въз основа на разликите в техните свойства, разкрити при физикохимичното им охарактеризиране.

По мое мнение това е **главното достойнство на този дисертационен труд, защото степента на дисперсност на активната фаза в един катализаторен композит е основния фактор за активността на катализатора.** Това ми позволява да направя заключението, че в случая се касае за **структурно промотиране** на катализаторен композитен материал – много ценна експериментална находка.

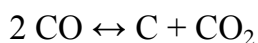
В заключение мога да кажа, че овладяването и ползването на всички тези методи, както и интерпретацията на данните, получени чрез тези методи, са допринесли в значителна степен за **научното израстване на докторантката като изследовател.** Задълбоченото изследване на тези фази и техните свойства, както и взаимодействието между тях е важно от гледна точка на теорията на катализа. В този смисъл, разработената в дисертационния труд тема би могла да намери **приложение като иновационна разработка,** тъй като предлага нови системи с подобрена каталитична активност. **Постигане на дисертанката е**

разкриването на последователност от стадии на механизма на каталитичната реакция.

Описаните в дисертацията изследвания са проведени на високо научно ниво, задълбочено и изчерпателно. Те имат интердисциплинарен характер и изискват познания и експертност в свършено различни области.

Изводите на дисертацията показват, че докторантката се е справила много успешно с всички етапи на това изследване. Прегледът на литературните данни, представен в дисертационния труд, показва много добра осведоменост на докторантката по темата. Цитираната литература е описана в добра последователност, прецизно и избирателно, със съпътстващ анализ и оценка на данните и с акцент върху тези от тях, които могат да подпомогнат изпълнението на поставените в дисертацията цели. Тя е успяла да намери верния начин за представяне на известната до момента информация за изучаваните обекти и отчетливо да акцентира върху собствените си изследвания и приноси към разработвания научен проблем. **Специално искам да подчертая приложния аспект на дисертационното изследване**, което е напълно в унисон с Иновационната стратегия за интелигентна специализация на Република България за периода 2014-2020 г. в съответната сфера интензивно иновационно развитие – технологии за получаване на екологично чисто водородно гориво.

Към представените в дисертацията изследвания имам следния коментар. Дисертантката дава на Фигури 18 и 21 селективността по CO при разлагане на метанол без да се даде точния израз, въз основа на който тази величина е изчислена. От гледна точка на кинетиката на хетерогенно-каталитичните реакции селективността се дефинира като съотношение на скорости на две реакции. В дадения случай това вероятно са скоростите на образуване на CO и на CO₂ т.е. $S_{CO} = R_{CO}/(R_{CO} + R_{CO_2})$. Направения от мен анализ на матрицата на стехиометричните коефициенти показва, че тя е от втори ранг – следователно дисертантката има право да разглежда система от два линейно-независими маршрута, които еднозначно описват превръщането в реакционната система. Възможно е да протича и трета реакция – диспропорциониране на CO:



Би могло да се определи термогравиметрично дали има отлагане на въглерод и дали тази реакция протича т.е. реакционната схема е паралелно-последователна, а не просто паралелна, но дори такава реакция да протича според направения от мен анализ тя не е линейно-независима, защото се явява линейна комбинация от другите две реакции на образуване на CO и CO₂. Тази забележка има по-скоро характер на препоръка за бъдеща работа в това направление без да намалява големия принос на настоящия дисертационен труд.

Стилът на изложението в дисертацията е ясен и точен, а дадените фигури и таблици са достатъчно информативни и илюстрират сполучливо същността на изследванията и резултатите от тях.

Заключение. Представените в дисертационния труд на Изабела Генова резултати са безспорен принос към каталитичната наука. Те хвърлят светлина върху структурата, свойствата и активността на различни фази, както и върху взаимодействието между тях.

На основата на направения по-горе анализ на научните изследвания в дисертационния труд, убедено препоръчвам на членовете на Почитаемото Научно Жури да гласуват „за” присъждането на научната и образователна степен „доктор” на Изабела Генова.

София, 13.07.2016 г.

Доц. д-р Александър Елияс