

СТАНОВИЩЕ

от проф. дхн Таня Стоянова Цончева, ИОХЦФ, БАН

на дисертация за присъждане на образователната и научна степен „доктор”

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

докторант: Изабела Георгиева Генова, ИОХЦФ, БАН

научни ръководители: проф. дхн Таня Стоянова Цончева, ИОХЦФ, БАН;

доц. д-р Радостин Николов, ХТМУ, София

научен консултант: доц. д-р Момчил Димитров Димитров, ИОХЦФ, БАН

Представеният дисертационен труд е написан на 263 машинописни страници, които включват 87 фигури, 5 схеми и 25 таблици. Литературният обзор обхваща близо половината от дисертацията. В него е направен подробен анализ на състоянието на проблема, свързан с алтернативните горива и по-конкретно, използването на метанола в качеството на алтернативно гориво; възможните пътища и катализатори за получаване на водород от метанол; обзор върху методите за получаване на мезопорести силикати и метални оксиди; основните методи, които се използват за модифицирането им с мед; влияние на дотиращи добавки от кобалт и манган върху състоянието на медната фаза и приложение на тези материали в катализа. Големият брой на използваните литературни източници (634), както и направените задълбочени изводи в края на литературния обзор, показват добрата работа на докторанта със световната литература и способността му правилно да подбира и обобщава литературния материал. На основата на направените изводи, докторантът ясно формулира целта на изследването си и произтичащите от нея конкретни задачи. Усилията на докторанта са насочени към изясняване на един много важен за създаването на високо ефективни катализатори въпрос, какъвто е получаването на активна фаза с регулируеми характеристики посредством лесно осъществим подход, а именно, чрез нанасяне върху порести носители. Докторантът е съсредоточил вниманието си към евтините и широко използвани в практиката медни катализатори, чието приложение обаче обикновено е свързано с някои съществени недостатъци, произтичащи от бързата

им дезактивация поради агломерация на медните частици. Оригиналноста на изследването е свързана с комплексния подход на вариране на състоянието на нанесената медна фаза чрез използването на съвременни материали с подредена пореста структура като носители, усъвършенстване на познатите методи за модифициране на тези носители или пионерното прилагане на известни за други системи, нетрадиционни методи за модифициране. В този смисъл, докторантът е получил добра подготовка върху получаването и модифицирането на наноструктурирани порести материали чрез използване на хидротермален-темплейтен метод, метод на омокряне, метод на «хемосорбция-хидролиза», като обучение върху последния е проведено и в рамките на едномесечна специализация в каталитична лаборатория в Милано. Изследванията върху формирането на нанесената медна фаза са проведени в логическа последователност. След изучаването на ефекта на порестата структура в система, в която носителът (силикат) не притежава каталитична активност, докторантът е насочил вниманието си към изясняване на сложните ефекти, които могат да възникнат при наличие на добавки, способни да образуват смесенооксидна (шпинелна) фаза с меднооксидните частици или при използването на носител (ZrO_2), който притежава собствена окислително-редукционна и киселинно-базична активност. С оглед детайлното характеризиране на състоянието на получените композитни материали, докторантът правилно е използвал комплекс от съвременни физикохимични техники. Текстурните свойства на материалите са характеризирани чрез нискотемпературна адсорбция на азот, техника която докторантът не само овладява в детайли, но и отлично се справя при обработката на резултатите със сложни софтуерни продукти. Показано е много добро владение и на други техники за характеризиране, с които докторантът се справя също самостоятелно: FTIR, UV-Vis и TPR. По време на изработване на дисертационния труд ас. И. Генова работи самостоятелно и на каталитична апаратура от поточен тип при използване на газ-хроматографски анализ на реакционните продукти. Добре обучена е и в основните методи за обработка на каталитичните резултати, като тези познания са подсилени и от положен изпит след посещение на специализиран курс по „Катализ и катализатори“. Аналогично, специализираното обучение и полагане на допълнителен изпит по „Неорганична кристалография и рентгеноструктурен анализ“, разширява познанията на докторанта върху структурното характеризиране на материалите. В тази насока е и овладяването на

метод за обработка на резултатите от ТЕМ. Наред с други спектроскопски подходи, между които XPS и FTIR на адсорбирани молекули (NO, CO, N₂, пиридин) за характеризиране на повърхностните свойства на материалите, докторантът за първи път се запознава и с един нов, разработен в лабораторията метод, основаващ се на използването на ¹¹C- белязан метанол. Този нетрадиционен подход е послужил на докторанта като основа за изясняването на механизма на процеса на разпадане на метанол върху различни каталитични центрове. Несъмнен принос на дисертационния труд са приведените доказателства за формирането на CO₂ като първичен продукт от разпадането на метанола върху медни катализатори при ниска степен на покритие на повърхността, за първи път разработената подробна реакционна схема на разпадане на метанол върху мед-циркониево-оксидни системи; приведените доказателства, че метилформиатът не е задължителен междинен продукт върху този катализатор. Направеният анализ показва, че докторантът е добре обучен в цялостната схема на получаване на високо ефективни катализатори чрез:

- Синтезирането на наноструктурирани и мезопорести материали при прилагане на съвременни, добре утвърдени техники, както и разработването на модифицирани такива;
- Комплексното физикохимично характеризиране на текстурните, структурни и електронни свойства на материалите;
- Изграждането на умения в провеждането на каталитични тестове върху сложни наноструктурирани материали.

Чрез правилното разбиране на природата на активните центрове и специфичната им роля в каталитичния процес, в докторанта е изграден правилен научно-обоснован подход за оптимизиране на свойствата на катализаторите. Не на последно място е и приложимостта на изследвания каталитичен процес в екологията и алтернативните горива, което правят дисертацията много актуална. В тази насока съществен принос имаха непрекъснатата дискусия на получените резултати с участието на научните ръководители и консултанта, активното участие в текущите проекти на лабораторията, постоянното представяне на резултатите на различни научни форуми чрез устни и постерни доклади и оформянето им като публикации при повишена самостоятелност на докторанта. Резултатите са представени на 11 научни мероприятия и оформени в 9 публикации (7 от тях в списания с импакт фактор), по които вече са забелязани 15 цитата.

Заклучение

Дисертационният труд на докторант Изабела Генова съдържа нови данни за възможностите за контрол на дизайна на нанесени върху порести материали метал/металооксидни катализатори за разлагане на метанол с оглед използването му като екологично чисто гориво при използване на научно обоснован подход, базиращ се на владеене на съвременни техники за получаване и модифициране на наноструктурирани материали, комплексното им характеризирание със съвременни физикохимични методи и правилното разбиране на механизма на формиране на каталитично активните центрове и ролята им в каталитичния процес. Активното участие на докторанта в изпълнението на проекти, публикационната му дейност и участие в научни форуми с устни и постерни доклади, както и успешно положените изпити по специалността, английски език и компютри, напълно отговарят на критериите, залегнали в Правилника на ИОХЦФ, БАН за присъждане на академични длъжности и научни степени. Това се доказва и със значителния брой кредити (918) в хода на обучение на докторанта. Всичко това, както и показаните качества на докторанта като изпълнителност, самостоятелност и настойчивост при решаване на задачите, ми дават основание убедено да препоръчам на членовете на уважаемото Научно жури да присъдят на докторант Изабела Генова образователната и научна степен “доктор” по професионално направление 4.2. ”Химически науки”, научната специалност „Нефтохимия и нефтохимичен синтез”.

С уважение,

София, 30.07.2016

Изготвил становището:

/проф. дхн Т. Цончева/