

## РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за придобиване на академичната длъжност „професор” по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност 01.05.16 „Химична кинетика и катализ”, обявен в ДВ брой 22 от 16. 05. 2012 г. за нуждите на лаборатория „Нови каталитични материали и наноразмерни катализатори”, тематично направление „Дизайн на хетерогенни катализатори” при Института по катализ, БАН, с единствен кандидат доц. д-р Татяна Тодорова Табакова

Рецензент: проф. дхн Тая Стоянова Христова, Институт по органична химия с Център по фитохимия, БАН

### 1. Общи данни за кандидата.

Татяна Тодорова Табакова е родена през 1954 г. в Троян. През 1978 г. завършва висшето си образование в Химико-технологичния институт, София, специалност „Технология на влакна и кожи”. През 1980 г. е назначена като химик в Института по органична химия, а от 1983 г. в Института по катализ (ИК) на БАН, където работи и досега. От 2005 г. заема академичната длъжност доцент в същия институт, с което напълно удовлетворява условието, залегнало в Правилника за реда за заемане на академични длъжности в БАН за необходимия стаж по специалността и академичната длъжност „доцент” в ИК, БАН.

През 1994 г. доц. Табакова защитава докторска дисертация на тема „Формиране на  $\alpha$ -FeOOH при окислителна хидролиза на  $Fe_2SO_4$  и получаване на  $\alpha$ - $Fe_2O_3$  с дефинирани свойства”. Двукратно е била на 6 месечна специализация в Университета, гр. Торино, Италия.

## 2. Научна продукция.

Доц. Татяна Табакова е съавтор на 82 публикации. По конкурса участва с 40 работи, публикувани в периода 2005-2012 г., т.е. след избирането ѝ на академичната длъжност доцент, които основно ще бъдат обект на настоящата рецензия. В реномирани международни списания с импакт фактор са публикувани 27 от рецензираните трудове, 11- в материали на конференции, 1 в сборник от трудове на ПУ „П. Хилендарски”, а една от работите е под печат в книга „Catalysis by ceria and related materials”, издателство Imperial College Press, Лондон.

Информация за разпределението на публикациите по списания с импакт фактор и забелязаните цитати по всяка от тях е представена в следната Таблица.

Списание	Импакт фактор	Забелязани цитати
Appl. Catalysis A:General (2005)	3.64	108
Stud. Surf. Sci. Catal.(2005)	0.31	2
Appl. Catal. B: Env.(2006)	4.75	33
Appl. Catalysis A:General (2006)	3.64	50
Appl. Catal. B: Env.(2006)	4.75	57
J. Catal. (2006)	5.71	23
Stud. Surf. Sci. Catal.(2005)	0.31	-
Chem. Eng. J.(2006)	3.17	39
J.Phys. Chem.(2006)	2.73	12
Catal. Commun.(2007)	2.90	37
React. Kin. Catal. Lett.(2007)	0.47	7
Appl. Catalysis A:General (2007)	3.64	14
Catal. Today (2007)	3.47	20
Catal. Today (2008)	3.47	25
Bulg. Chem.Commun.(2008)	0.16	1
J. Catal. (2008)	5.71	41
Catal. Today (2008)	3.47	23
J. Mat. Sci. (2009)	2.32	4
J. Mat. Sci. (2009)	2.32	5
J.Phys. Chem.(2010)	2.73	5
Appl. Catal. B: Env.(2011)	4.75	5
Appl. Catal. B: Env.(2011)	4.75	4
Chemistry A. Eur. J.(2011)	5.48	2
J. Porous Mater. (2012)	0.98	-
React. Kin. Catal. Lett.(2012)	0.47	-
React. Kin. Catal. Lett.(2012)	0.47	-
Catal. Today (2012)	3.47	

Както се вижда от приложената справка, кандидатът показва много добра постоянна публикационна активност за целия рецензиран период 2005-2012 г. Основна част от публикациите са в списания с висок импакт фактор, между които J. Catal (2 работи), Chemistry-A Eur.J.(1 работа), Appl. Catal.B (4 работи), Appl. Catal. A (3 работи), Catal. Commun. (1 работа), Catal. Today (4 работи) и др. В 22 от публикациите д-р Табакова е на 1 или 2 място в авторския колектив, което недвусмислено подчертава водещата ѝ роля в проведените изследвания. Доказателство за значимостта на публикационния труд на кандидата за този период е значителният сумарен импакт фактор на представените публикации (IF= 77.72). Бих искала да обърна внимание на високата цитируемост на статиите, като общият брой на забелязаните цитати върху статиите, публикувани през рецензирания период, е 517. Заслужава да се отбележи и фактът, че отзвук в литературата са намерили и статии, публикувани дори през изминалата година. Този анализ подчертава актуалността на изследванията на кандидата, както и значимостта на получените резултати.

Д-р Табакова активно участва в разработването на 6 патента и авторски свидетелства. Един от тези патенти „Златни катализатори за конверсия на CO с водна пара”, разработен съвместно с колеги от Института за изследване на материалите, Севиля, е заявен през рецензирания период. През целия научно изследователски стаж д-р Табакова работи в колективи по внедряването на редица катализатори в индустрията, както и върху разработването на технологии за почистване на трансформаторните масла, конверсия на метан с водна пара и технология за производство на катализатор за предварителен паров риформинг. Тази активност подчертава стремежа на кандидата да обвърже своите научни изследвания с практиката и е гаранция за високото качество на получените научни резултати и натрупан значителен опит в областта на синтеза и

характеризирането на катализаторите, което напълно отговаря на обявената тематика на конкурса.

Част от научните изследвания на доц. Табакова са представени с доклади на 54 научни конференции и симпозиуми у нас и в чужбина. Изнесени са и 5 устни доклада в университети в Италия и Китай, работна среща на COST D15, Франция, както и на 7-мата Научна конференция по химия, 2008 г.

### **3. Анализ на научните приноси.**

Основната научно изследователска дейност на доц. д-р Татяна Табакова е свързана със синтеза на нови материали с оглед приложението им в решаването на някои енергийни и екологични проблеми. Получените материали са изследвани във важни каталитични процеси, които са в основата на получаване и пречистване на водород чрез конверсия на CO с водна пара (WGS) и селективно окисление на примеси от CO във водород. Очертава се тези процеси и занапред да намират широко приложение с оглед световната тенденция за широко използване на водорода като гориво за захранване на горивните елементи и масовото им приложение в индустрията и мобилните превозни средства, в сравнително кратък срок. Алтернативно направление в научно изследователската работа на кандидата е проучване на възможностите за използването на тези материали като катализатори за очистване на токсични емисии от CO и летливи органични съединения. Тези направления очертават актуалността на тематиката на кандидата, което намира израз в активна съвместна работа с много български и чуждестранни партньори, както и в реализирането на редица национални и международни проекти (по-подробна информация е дадена по-долу). Активното участие в разработването на патенти и технологии очертават и научно-приложната стойност на изследванията на кандидата, което безспорно е съществен принос. При

синтеза на катализаторите д-р Табакова прилага научно обоснован подход, който се основава на изясняване на връзката между състав, структура и реакционна способност на материалите и детайлно изследване на природата на каталитично активните центрове и механизма на реакциите върху тях. Обект на изследване са Au, Ag, Cu или Pd катализатори, нанесени върху металооксидни носители с различни текстурни и морфологични характеристики, между които CeO<sub>2</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ThO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, както и бicomпонентни системи на основата на оксиди на Ce, Ti, Zr, Sm, Zn, La, Fe, Mn, Co, Sn и Al. Специално внимание е отделено на влиянието на препаративния метод върху свойствата на получените катализатори, като са направени съществени изводи в тази насока.

За характеризирание на материалите са използвани подходящи съвременни физични и физикохимични методи, между които азотна физисорбция при ниски температури, рентгенова дифракция, HRTEM, XPS, Раманова спектроскопия, ИЧ спектроскопия с адсорбция на CO, температурно програмирана редукция и др.

Основните приноси на кандидата по очертаните направления могат да се определят както следва:

### **1. Синтез на нови материали.**

- За първи път титановооксидни нанотръбички са използвани като носител за стабилизиране на златни нанодисперсни частици и е изследвано приложението им като катализатори в WGS. Показана е преимуществена локализация на златните наночастици в тръбичките, което разкрива потенциал за регулиране на каталитичната активност посредством фазовия състав и размера на тръбичките на титановооксидния носител;

- За първи път е синтезиран злато съдържащ катализатор на основата на  $\text{ThO}_2$ , за който е демонстрирана изключително висока активност и стабилност в WGSР при относително ниски температури. Авторите доказват, че тези каталитични отнасяния са свързани с поддържане на златните частици във високо дисперсно състояние върху ториевооксидния носител и създаването на активна гранична повърхност между тях, която облекчава формирането на формиатни интермедияти;

- Показано е, че дотирането на цериевооксидните носители с оксиди на Sm или Zn води до подобряване на текстурните му характеристики и повишава редуцируемостта му, с което стабилизират нанесените златни или меднооксидни частици във високодисперсно състояние.

-Получен е нов злато нанесен върху  $\text{CeO}_2\text{-TiO}_2$  катализатор като е показано формирането на катионни златни кластери, малки метални частици и отрицателно заредени плоски образувания, чието съотношение може да се контролира чрез състава на носителя. Присъствието на малки метални частици, чийто дял е по-висок за катализаторите с ниско отношение Ce/Ti определят по-високата каталитична активност в WGSР. Новост е и синтезът на мезопорест титанов оксид, модифициран с церий като носител на златни наночастици.

-За първи път е приложен метод на механохимично активиране за получаване на цериево-алуминиево оксидни носители на златни катализатори. Показано е благоприятното влияние на  $\text{Al}_2\text{O}_3$  като структурен промотор за стабилизиране на златото и церия във високо дисперсно състояние.

- Синтезиран е нов катализатор на основата на злато, нанесен върху модифициран с цериев оксид мезо/макро-порест  $\text{TiO}_2\text{-ZrO}_2$  с висока специфична повърхност и поров обем и високо съдържание на кислородни ваканции. Тези свойства на носителя

осигуряват висока дисперсност на нанесените златните частици и го правят подходящ за разработването на катализатори за WGSR;

## **2. Фундаментални изследвания.**

- Доказано е, златните наночастици, нанесени върху цериевооксидни носители благоприятства формирането на кислородни ваканции, които са от съществено значение за високата каталитична активност в конверсия на CO с водна пара. По-активни катализатори се получават при нанасяне на златото върху добре кристализирал CeO<sub>2</sub>. Подкрепен е механизъм, който включва реакция на граничната повърхност с адсорция на CO върху метала и дисоциация на водните молекули върху цериевооксидните дефекти, намиращи се на повърхността на носителя, което е предпоставка за намиране на връзка между методите на синтез на катализаторите и каталитичната им активност в WGSR.

- Показано е, че в случая на мед активиран CeO<sub>2</sub>, определящо значение има електронният обмен Cu<sup>1+</sup>-Cu<sup>0</sup>, който се осъществява в близост до Ce<sup>3+</sup> центровете;

- Доказано е, че високата активност на злато-цериевооксидните катализатори се определя от формирането на Au<sup>δ+</sup>V<sub>0</sub>Ce<sup>3+</sup> активни комплекси с оптимално съотношение между различните компоненти. Реакционната среда може съществено да промени състава на комплекса посредством електронен пренос;

-Приведени са допълнителни доказателства в подкрепа на хипотезата, че златните клъстери и Ce<sup>3+</sup> дефектите са активни центрове в WGSR, но не и в селективното окисление на CO във водород. В този процес определяща роля имат „стъпковидните” места върху металните златни частици;

- Показано е, че добавки от Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> към цериевооксидните носители не повишават съдържанието на каталитично активните Ce<sup>3+</sup> дефекти и кислородни ваканции,

вероятно поради специфичната локализация на желязните йони в кристалната решетка на  $\text{CeO}_2$ .

### **3. Резултати с приложен характер.**

Разработен е ефективен СО хемосорбционен метод за количествено определяне на златни активни центрове върху металоксидни носители.

### **4. Участие в проекти. Организационна и експертна дейност на кандидата.**

Д-р Татяна Табакова активно работи по научно изследователски проекти, финансирани от национални предприятия и ФНИ към МОМН. Участник е в 26 Международни проекта с научни институти и университети от Румъния, Полша, Белгия, Латвия, Италия, Гърция, Китай и Испания, на 4 от които е и ръководител. Няколкократно е участник в проекти по програми на NATO и COST, свързани с решаване на проблеми по опазване на околната среда и разработване на алтернативни енергийни източници.

Доц. Табакова взема активно участие в работата на редица научни организации и форуми, между които Европейската федерация на каталитичните дружества (EFCAT) и Клуба на българските каталитици. Многократно участва в организирането на научни симпозиуми и конгреси у нас. Рецензент е на проекти по 7-ма РП и проект на Агенцията за изследване и иновации, Кипър. Многократно рецензира статии в международни специализирани списания, редактор е на том на RSC.

За активната си научна дейност доц. Табакова е награждавана със златен медал на Международния панаир, Пловдив (1989 г.); грамота от ИНРА (1990 г.); златен медал на 6-то международно изложение "East-West Euro Intellect" (1998 г.), носител е на награда на Българската стопанска камара (1998 г.).



Д-р Табакова активно участва и в дейността на ИК като член на Атестационната комисия и член на Научния съвет при института.

Познавам кандидата и имам наблюдения върху научната му дейност от много години. Имам много добри впечатления от активната ѝ работа и постоянен стремеж за обновяване и актуализиране на научните изследвания, за поддържане на многобройни контакти, включително и с чуждестранни партньори, за прекрасните ѝ взаимоотношения с колегите и способността ѝ да работи в екип. Доказателство за това са коректно представените разделителни протоколи за съвместни изследвания с партньорите.

По представените материали нямам критични бележки.

## **5. Заключение**

Научните изследвания на доц. д-р Татяна Табакова в периода след избирането ѝ на академичната длъжност „доцент” изцяло отговарят на тематиката на обявения конкурс за присъждане на академичната длъжност „професор”. В този период д-р Табакова се оформя като водещ учен в областта на синтеза и характеризирането на нови материали с приложение като катализатори в процеси с потенциално значение за енергетиката и екологията. Много добро впечатление прави и интензивната работа по създаването на патенти и проучване на възможностите за практическа реализация на получените продукти. Като имам пред вид и значителния брой на публикуваните материали в реномирани списания, изнесените доклади на международни научни форуми и забележителния брой на цитатите по публикуваните материали, които напълно отговарят на изискванията на Правилника на ИК, БАН за присъждане на академични длъжности, убедено препоръчам на членовете на уважаемото Научно жури и на

почитаемия Научния съвет на ИК, БАН да присъдят на доц. д-р Татяна Табакова от Института по катализ, БАН, академичната длъжност “професор” по научната специалност 01.05.16 „Химична кинетика и катализ”.

29.06.2012 г.

Рецензент:

София

/ проф. дхн Таня Христова/