

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс, обявен в ДВ бр. 67 от 28.07.2020 за заемане на академичната длъжност „доцент” по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Химична кинетика и катализ“ за нуждите на лаборатория „Нови хетерогенни катализатори за чиста енергия и опазване на околната среда“, Институт по катализ, Българска академия на науките

Кандидат по конкурса: гл. ас. д-р Радостина Димитрова Палчева, служител в Институт по катализ, Българска академия на науките

Рецензент: проф. дхн Таня Стоянова Цончева, Институт по органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките

1. Общи данни за кандидата.

Радостина Палчева е родена през 1975 г. През 1999 г. завършва като магистър Химическия факултет на СУ “Климент Охридски“, а през 2001 г. постъпва като химик в Института по катализ, Българска академия на науките (ИК, БАН). През 2003 г. е зачислена като редовен докторант в същия институт. Радостина Палчева защитава докторска дисертация на тема „Синергизъм между компонентите в NiW/ γ -Al₂O₃ катализатори за хидродесулфуриране” през 2006 г. През 2007 г., след спечелен конкурс, е назначена за главен асистент в ИК, БАН, където работи и до момента. В периода 2010-2012 г. д-р Палчева специализира в Университета в Осло, Норвегия, в областта на дизайна на оксидни материали за селективен катализ, а през 2014 г. в резултат на спечелена стипендия е на краткосрочна специализация в Католическия университет на Льовен, свързана с физикохимичното характеризирание на катализатори за производство на енергия.

2. Обща оценка на научната дейност на кандидата.

Д-р Палчева е съавтор на 25 публикации, 21 от които са публикувани в списания с импакт фактор. В конкурса кандидатът участва с 20 статии, 17 от които са с импакт фактор и са разпределени както следва: 8 от публикациите са в списания с квантил Q1, 4- Q2, 3- Q3 и 2- Q4. Статиите са публикувани в престижни специализирани издания като “Applied Catalysis B: Environmental“ (1 бр.), “Applied Catalysis A: General“ (1 бр.),

Applied Surface Science (2 бр.), Catalysis Letters (2 бр.), Microporous and Mesoporous Materials (1 бр.), Topics in Catalysis (1 бр.) и др. Публикуването на материалите е сравнително равномерно в целия период след защитата на дисертационния труд, като над 1/3 от тях са публикувани през последните 5 години. Тези резултати показват висока изследователска активност на кандидата след защита на докторската дисертация. В по-голяма част от статиите д-р Палчева е на първа или втора позиция в авторския колектив, което е доказателство за водещата ѝ роля в изследванията и интерпретацията на резултатите.

Много активно е и участието ѝ в международни и национални научни форуми. По темата на конкурса е представила 26 доклада, 5 от които устни. В базите данни WEB OF SCIENCE и SCOPUS за забелязан им 297 цитирания на публикациите, включени в конкурса. По две от статиите, публикувани в Micropor. Mesopor. Mater. (2009) и Appl. Surf. Sci., в които кандидатът е първи автор, са забелязани значителен брой цитирания (съответно 45 и 50). Много добро впечатление прави и високата цитируемост на статии, публикувани през последните години. Така например, публикацията на д-р Палчева в Appl. Surf. Sci. (2015) е цитирана 27 пъти, а тази в Appl. Catal. B: (Environmental) (2018) -30 пъти. И в двете публикации д-р Палчева е водещ автор, което още веднъж доказва актуалността и високото качество на изследователската ѝ дейност.

Гл. ас. Радостина Палчева активно участва в колективите по изпълнението на проекти, финансирани от Фонд научни изследвания или в рамките на двустранните сътрудничества с Чехия и Белгия. В 3 последователни сесии тя е и ръководител на проекти по международния обмен с Чешката академия на науките.

Д-р Палчева упражнява и активна експертна дейност, като многократно рецензира публикации в престижни списания, както и проекти в конкурсни сесии на ФНИ.

Индексът по Хирш на кандидата въз основа на всички публикации, включени в базата данни на ISI, е 13 (Scopus). Оценките на кандидата по показатели, съгласно минималните изисквания на ЗРАСРБ на РБългария, са посочени в Таблица 1. Общата оценка по всички показатели надвишава близо 2.5 пъти минимума, поставен в ЗРАСРБ, като много съществен дял имат цитиранията на научните трудове на кандидата. Въпреки че съгласно ЗРАСРБ по показател *E* не се изискват точки, и те не са отразени в документите на кандидата, участието му в проекти по ЕБР и ФНИ, както и ръководството на проекти по ЕБР осигуряват допълнително 120 т. Анализът на

количествените резултати от изследователската дейност показва, че д-р Палчева напълно отговаря на минималните изисквания, поставени от ЗРАСРБ и правилника на ИК, БАН.

Таблица 1. Оценка на кандидата по показатели, съгласно минималните изисквания на ЗРАСРБ на РБългария

Показател	Точки ЗРАСРБ	Точки кандидат
А. Дисертационен труд "доктор"	50	50
В. Хабилюационен труд	100	130
Г. Научни публикации извън хабилюационния труд	220	229
Д. Цитирания	60	594
Общо	430	1003

3. Основни приноси от научно-изследователската дейност на кандидата.

Научно изследователската дейност на кандидата е тясно свързана с оптимизиране дизайна на катализатори за процеси с пряко отношение към опазване на околната среда като: получаване на водород и горива с ниско съдържание на сяра, пълно окисление на летливи органични вещества, получаване на ценни за индустрията вещества, включително и чрез оползотворяване на отпадни продукти.

3.1. Оценка на хабилюационния труд.

Хабилюационният труд на д-р Палчева е насочен към изследване на каталитичната активност на Co(Ni)-Mo(W) смесенооксидни катализатори в процеса на хидродесулфориране (ХДС) на сяра- съдържащи съединения. Като моделни системи са използвани тиофен и 1-бензотиофен. Изследвано е влиянието на редица фактори, между които: метода на получаване на катализаторите и носителите, техния състав и природата на модифициращите добавки. Наред с традиционно използвания Al_2O_3 , в качеството на носители за първи път са изследвани титановооксидни нанотръбички и мезопорести силикати, модифицирани с Nb_2O_5 . Изследван е ефектът от дотиране на Al_2O_3 с различно количество ZnO , както и влиянието на добавки от SiO_2 върху

формирането на Ni-Mo катализатори за ХДС. Резултатите са обобщени в 6 публикации в специализирани издания с импакт фактор, съответно 3 от тях с квантил Q1, 2- с квантил Q2 и 1- с Q4. С изключение на една, във всички статии кандидатът е на първо място.

Може да се отбележат следните по-важни резултати от изследванията, описани в хабилитационния труд:

- Установено е, че предварителното модифициране на алуминиево оксидния носител с никел или кобалт и следващото импрегниране с Андерсон - тип хексамолибдат подтиска образуването на неактивните кобалтов или никелов алуминат и благоприятства запазването на хетерополи аниона върху повърхността на катализаторите. Тази процедура води до получаването на високо активни катализатори за ХДС, като особено добър ефект върху активността и стабилността на катализаторите се наблюдава при нанасяне на Ni хетерополиоксомолибдат върху Ni- модифициран Al_2O_3 . Показано е, че при използването на носител Al_2O_3 , получен чрез механохимичен синтез, катализаторът притежава по-висока каталитична активност от тази на търговския продукт.

- Показан е благоприятен ефект от използването на нитрилооцетна киселина в качеството на комплексообразувател при получаването на NiMo катализатори за ХДС, който се дължи на образуването на голямо количество сулфидна фаза, съдържаща лабилна сяра.

- Оптимизирани са условията за получаване на високоактивен катализатор за ХДС на базата на модифициран с Nb мезопорест силикат тип SBA-15. За първи път е изследван ефектът от текстурата на силикатния носител върху формирането на каталитично активните центрове. Показано е, че присъствието на микропори в HMS силиката води до частична сегрегация на Nb_2O_5 , което променя механизма на сулфидиране и затруднява формирането на активните комплексни Ni-Mo-S центрове.

- Демонстрирано е, че съдържанието на активните Ni^{2+} октаедрични йони, MoO_4^{2-} тетраедрични йони и Mo полимерни форми в NiMo/Al-Zn катализатори може да се контролира чрез съотношението Zn/Al и добавки от SiO_2 в носителите.

В заключение, бих искала да подчертая, че изследванията, представени в хабилитационния труд, са принос в оптимизиране на състава на композитни катализатори за хидродесулфориране на дизелово гориво и имат отношение към опазването на околната среда.

3.2. Оценка на научните изследвания извън хабилитационния труд.

14 научни публикации, 11 от които са реферирани и индексирани в база данни (WoS/Scopus), с които кандидатът участва в конкурса, не са отразени в хабилитационния труд и ще бъдат обект на рецензията по-долу. Изследванията са широкоспектърни, с подчертано приложен характер и са насочени към синтез на ефективни катализатори за редица каталитични процеси, свързани с горивата, екологията и качеството на живот, между които хидродесулфуриране на тиофен и 1-бензотиофен, частично окисление на метан, риформинг на метан с CO₂, пълно окисление на етанол, дехидратация на глицерол, директно превръщане на етен до пропен. Катализаторите са от нанесен тип. За синтеза на носителите (алуминиев оксид, силициев оксид, смесени оксиди, модифицирани мезопорести силициеви оксиди, оксиди с перовскитна структура) са използвани различни методи, между които хидротермален, механохимичен и зол-гел. Като активен компонент са нанасяни както благородни, така и редица преходни метали. Всички изследвания се основават на задълбочени изследвания с различни съвременни физикохимични техники (XRD, XPS, UV-Vis, FTIR, ²⁹Si MAS NMR, TEM, хемосорбция на кислород и др.), което подпомага правилното разбиране на природата на активните центрове в различните каталитични процеси.

- Оценявам високо работата на кандидата върху получаването на CoMo/γ-Al₂O₃ катализатор и изпитанията му в пилотна инсталация под налягане в процеса на ХДС на леки горивни фракции. Внимание заслужават и направените сравнения с търговски катализатори и анализа на резултатите от тези проучвания, които са ценен източник за следващо оптимизиране на катализаторната формула. Тези изпитания имат и още едно съществено значение, подчертавайки ролята на предварителното модифициране на алуминиевия оксид с никел или кобалт и използването на воден разтвор на амониева сол на Co(Ni)Mo₆ за синтеза на високо ефективни катализатори за хидрообезсерване на горива.

От съществен интерес са и следните резултати:

- Показано е, че в катализаторите за ХДС на базата на нанесени NiMo върху Ce-Al смесенооксидни носители, прекурсор на активната фаза е NiMoO₄, който се формира в резултат на взаимодействието на Ni и Mo с Al₂O₃.

- Интерес представляват изследванията върху формирането на активнат WS₂ фаза в NiW модифицирани мезопорести силикати, тип SBA-15 и HMS. За първи път е направено сравнение на ефекта от природата на метала, модифициращ мезопорестия

силикатен носител SBA-15 (Al, W, Ti), неговото количество и използвания W- прекурсор върху каталитичната активност на NiW катализатори за ХДС на тиофен. Демонстрираната хидрогениращата активност на изследваните катализатори в сравнение с NiW/ γ -Al₂O₃ катализатор има пряко отношение към оптимизирането на катализаторите за получаване на качествени и екологично чисти горива чрез комбиниране на ХДС, хидрокрекинг и хидроизомеризация.

Заклучение

Научните изследвания на д-р Радостина Палчева са съществен принос в разработването на ефективни катализатори с приложение в нефтохимията, алтернативните горива и екологията. Голяма част от изследванията на кандидата са насочени към получаването на чисти горива чрез разработване на нови катализатори за ХДС, но са демонстрирани и данни за ефективни катализатори за получаване на водород чрез риформинг на метан с CO₂ или частичното му окисление, унищожаване на емисии от етанол, получаване на ценни химикали чрез преработване на продукти, които могат да се извлекат от отпадъчна биомаса. Широкото вариране на препаративните техники, съчетано с детайлен и задълбочен анализ на състава, повърхностните характеристики и каталитични отнасяния на получените материали, показват добре изграден научно обоснован подход у кандидата при оптимизиране свойствата на катализаторите за различни приложения. Високо оценявам усилията на д-р Палчева да излезе от рамките на лабораторните изследвания като провежда изпитания на един от катализаторите за ХДС на леки горивни фракции в пилотна инсталация под налягане. Кандидатът демонстрира много добри количествени показатели, които многократно надхвърлят изискванията на ЗРАСРБ и Правилника на ИК, БАН към него. Резултатите от изследванията са публикувани в престижни списания, а водещата позиция на д-р Палчева в почти всички публикации показва нейната ангажираност както в планирането и провеждането на експеримента, така и в анализа на получените резултати. В допълнение, искам да подчертая високата цитируемост на резултатите от изследванията, което доказва тяхната актуалност и значимост.

Считам, че качествата на кандидата напълно съответстват на изискванията на ЗРАСРБ за заемане на академичната длъжност „доцент” по професионално направление 4.2. Химически науки (Химична кинетика и катализ) и ще са от съществена полза за нуждите на лаб. „Нови хетерогенни катализатори за чиста енергия

и опазване на околната среда“, ИК, БАН, за чиито цели е обявеният конкурс. Поради това, убедено препоръчвам на членовете на уважаемото Научно жури и на почитаемия Научен съвет на ИК, БАН да присъдят на д-р Радостина Палчева, понастоящем главен асистент в същия институт, академичната длъжност “доцент”.

София, 27.10.2020 г.

Рецензент:

/ проф. дхн Таня Цончева/