

## СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Румяна Минева Кърджиева, ИК- БАН

относно: обявен конкурс за избор на „Професор”  
в професионалното направление 4.2. „Химически науки”,  
научна специалност 01.05.16 “Химична кинетика и катализ”  
за нуждите на лаборатория “Нови каталитични материали и наноразмерни катализатори” по  
тематично направление „Дизайн на хетерогенни катализатори”  
обнародван в “Държавен вестник” бр. 22 от 16.03.2012 г.

По обявения конкурс за избор на „Професор” в ДВ бр. 22 от 16.03.2012 г. по професионално направление 4.2 „Химични науки” и научна специалност 01.05.16 „Химична кинетика и катализ” за нуждите на лаборатория “Нови каталитични материали и наноразмерни катализатори” по тематично направление „Дизайн на хетерогенни катализатори” се явява единствен кандидат доц. д-р Татяна Тодорова Табакова. Кандидатката е завършила с отличен успех (5.50) висшето си образование в Висшия химико-технологичен институт, София „Технология на влакна и кожи през 1978 г. През 1980 г. постъпва на работа като химик в Института по органична химия – БАН, а от 1983 г. - в Института по катализ –БАН, където последователно е заемала длъжностите химик, научен сътрудник II-I ст., а от 2005 г. е ст.н.с. II ст., понастоящем „доцент”.

Доц. д-р Татяна Тодорова Табакова има впечатляващ брой научни публикации - общо **81**, като в конкурса за „професор” участва с **39**, включително 1 глава от книга и с 1 международен патент от общо **6**. От публикациите, включени за конкурса, **28** са в списания с ИФ (*Appl. Catal. A u B., J. Catal., Catal. Today, J. Phys. Chem. A u B, Catal. Commun, Chem. Eng. J., J.Mat. Sci.*, поредицата *Stud. Surf. Sci. Catal.*) и **11** - в материали от престижни конгреси и конференции. В тях кандидатката е на първо място в 14, на второ – в 8, на трето – в 7. Държа да отбележа, че независимо от мястото, тя е кореспондиращ автор на **14** от тях, което е знак за поемане на отговорност върху цялостното изследване на колективи с международно участие. Броят на участията в наши и международни научни форуми е забележителен – за целия период **67** в международни, за конкурсния - **34** (вкл. **4** устни доклада) и в национални - за целия период **30**, за периода на конкурса – **20** (вкл. **1** устен доклад). Върху публикациите са забелязани общо **1885** цитата за целия период, **1600** - за периода на конкурса (2005-2012) и **517** - на статии за конкурса . h-индексът е **23** като неговият създател, Dr. Hirsh, счита, че този индекс за длъжността професор във физическите науки е добре да бъде около 18. Представен е и списък на участията в научни проекти: международни - **26**, за периода на конкурса – **13**, като доц. Т. Табакова е ръководител на **4** от тях; национални - **10**, за периода на конкурса – **4**. В материалите по конкурса е представен коректно и разделителен протокол за приносите на кандидатката в общите работи с другите съавтори.

Основните направления, по които е работила кандидатката, могат да се обобщят, както следва:

**1. Дизайн на нови хетерогенни катализатори за получаване на чист водород чрез реакциите на конверсия на въглероден оксид с водна пара (КВОВП) и селективно окисление на СО в присъствие на водород (СелОкс).**

И двете каталитични реакции получиха много бързо развитие през последните 20 години, предлагайки получаване на чист водород за приложение в полимер-мембранните (РЕМ) горивни клетки.

Основната част от резултатите по направление 1 включва научните трудове с номера 1-22, 25, 27-31, 33, 36 и патент 6, съгласно подреждането им в приложения списък. Изследванията са проведени главно в рамките на международни научно-изследователски проекти с Италия, Полша, Белгия, Гърция, Румъния, Испания, Китай, COST и NATO. Те представляват задълбочаване и разширяване на успешните изследвания от предходния период.

Изучено е влиянието на метода на получаване върху структурните и каталитични свойства на 1B метали (Au, Cu и Ag), нанесени на цериево-оксидни материали, модифицирани с йони на редкоземни и преходни метали. Изборът на вариантите за синтез е ръководен от хипотезата за получаване на висока дисперсност и повърхностната концентрация на нанесените метални частици т.е. по-голям брой активни места на повърхостта. Цериявият диоксид, като редицируем носител, е избран заради определено дефектната си структура и способността да обменя решетъчен кислород с газовата фаза. За повишаване на активността, селективността и стабилността на катализаторите са използвани модифициращи добавки от йони с по-ниска валентност, близък йонен радиус и електроотрицателност, които влияят върху редокс свойствата на церия, предизвикват напрежение в

решетката на оксида и благоприятстват образуването на кислородните ваканции в структурата му, съответно увеличават подвижността на кислорода. Получени са мезопорести и наноструктурни носители.

Приложението на различни процедури за нанасяне на компонентите: чрез утаяване върху добре изкристализирал  $\text{CeO}_2$  (deposition-precipitation - DP) или върху свежо-утаен цериев хидроксид (modified deposition-precipitation - MDP), съутаяване (CP) и механохимично смесване (MA), метода "washcoating", метода на изгаряне с карбамид водят до различия в структурата на носителите и предизвикват и обясняват разликите в каталитичното поведение на образците в различните реакции.

Експериментално е доказана ефикасността на DP метода в реакциите на КВОВП и СелОкс при използването като носител на предварително синтезиран  $\text{CeO}_2$ . Нанасянето на нанодисперсно злато води до модификация на повърхностните свойства на  $\text{CeO}_2$ , като променя координационната ненаситеност на  $\text{Ce}^{4+}$  и благоприятства появата на  $\text{Ce}^{3+}$  дефекти на повърхността. В същите реакции ефикасността на MA метода пред методът на съутаяване при модифициране на цериев диоксид с оксиди на преходни метали ( $\text{MxOy}$ ) е свързана с повишаване на повърхностната дефектност, водеща до повишената подвижност на кислорода. Повишената каталитична активност в КВОВП на механохимично синтезирания образец, съдържащ  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , в сравнение с получения по метода "washcoating", е обяснена с формирането на активен комплекс ( $\text{Au}^{\delta+}\text{-Vo-Ce}^{3+}$ ) и с установяването на оптимално съотношение между положително заредените златни частици. Експериментално е доказано възникването на отделна фаза от оксидите на Fe и Mn от повърхността, способна да активира кислорода в реакцията на СелОкс. Демонстрирано е, че едностепенния метод на изгаряне на медта с карбамид представлява перспективен подход (ниска цена, опростена и бърза процедура, неизползваща разтворител) за синтез на образци, съдържащи нанодисперсни  $\text{Cu}^0$  частици (със среден размер 1.45 nm), показващи висока активност и стабилност в ниско-температурна КВОВП в сравнение с метода на отлагане на медта чрез утаяване върху предварително приготвен модифициран  $\text{CeO}_2$ . Създаден е нов златен катализатор, синтезиран чрез утаяване върху носител ториев оксид, показващ много висока каталитична активност при най-ниската възможна температура ( $120^\circ\text{C}$ ) за провеждане на реакцията на КВОВП при използваните експериментални условия. Показано е, че нанасянето на злато чрез утаяване върху наноструктурирани мезопорести оксиди ( $\text{ZrO}_2$  и  $\text{CeO}_2$ ) води до получаването на активни катализатори за ниско-температурна КВОВП.

Получени са нови експериментални доказателства на редица работни хипотези, като 1. протичане на реакцията на КВОВП на границата метал-носител чрез активирането на CO върху металните частици, дисоциацията на водата – върху кислородните ваканции и преобладаващите междинни продукти – формиатите; 2. решаващата роля на златните клъстери и  $\text{Ce}^{3+}$  дефектите за активността в КВОВП и участие на т.н. „стъпковидни“ (step sites) места върху златните частици в активирането на CO и кислорода в реакцията на СелОкс. 3. протичането на зародишообразуването и формирането на златни клъстери предимно в близост до дефектните места на носителя.

Получено е първото експериментално доказателство за появата на златен хидрид върху нанесени хетерогенни катализатори. За първи път е регистрирано наличието на положително заредени златни клъстери, стабилизиращи на границата на двата оксида: мезопорест  $\text{TiO}_2$ , модифициран с  $\text{CeO}_2$ . За първи път титанови нанотуби са използвани като носител на златни катализатори за КВОВП и е предложен подход за повишаване на активността чрез увеличаване размера на нанотубите или модифициране на тяхната кристална структура чрез преобладаване на фазата от анатаз.

Натрупаният опит и знания са довели до регистриране на международен патент за получаването на нови златни катализатори на основата на  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , модифициран с Ce и йони на преходни метали (Fe, Zn, Co и Ni) в реакцията на КВОВП.

Признание за интереса на научната общност към изследванията на златни наночастици, нанесени на  $\text{CeO}_2$  и  $\text{CeO}_2$ -съдържащи материали, като катализатори за КВОВП и СелОкс, е поканата за написване на глава от книгата "Catalysis by ceria and related materials" (труд № 36).

Второто основно направление в изследванията, а именно **Създаване на нови каталитични материали за почистване на въздуха от CO и летливи органични съединения (ЛОС)**, обхваща работи с No 23, 24, 26, 37-40.

И в тези реакции с екологично значение са изследвани структурните и каталитични свойства на 1Б метали (Au, Cu и Ag), нанесени на цериево-оксидни материали, модифицирани с йони на редкоземни и преходни метали. 1. И в този случай превъзходството на златните катализатори се изразява във високата дисперсност на златните частици и наличието на  $\text{Ce}^{3+}$  дефекти, които водят до

пълно окисление на CO при 40°C. Показано е, че по-слабата способност на сребърните наночастици да адсорбират и активират CO е причина за по-ниска активност. Подобна е зависимостта и при окислението на метанол и диметиллов етер. 2. Много висока активност за пълното окисление на бензен върху златни катализатори, нанесени на цериев диоксид, модифициран с йони на Fe, Mn, Co и Sn, е установена само при използване на синтезирания чрез MA и дотиран с кобалтови йони CeO<sub>2</sub>. В този случай решаваща роля за активността има активирането на стабилната молекула на бензена, а не наличието на силно подвижен кислород. 3. Изтъкнато е предимството на материали с мезопореста структура в разпределение на порите в тесен интервал, висока специфична повърхност и висока дисперсност на медно-оксидната фаза в реакцията на окисление на n-хексан. 4. Показано е, че наличието на повече наноразмерни метални частици на повърхността повишава мобилността на повърхностно разположения кислород, което е важна предпоставка за подобряване на активността в окислителните реакции.

Авторска справка за приносния характер на трудовете на доц. д-р Татяна Табакова доказва, че тя е разработвала нови високо активни, селективни и стабилни катализатори въз основа на детайлното опознаване на структурните особености на изследваните системи. Свързването им с каталитичните свойства допълва хипотези и предположения и разкрива нови аспекти в механизма на каталитичното действие в изследваните реакции.

Представените материали са много грижливо подготвени и по тях нямам критични бележки.

Познавам доц. Т. Табакова от постъпването ѝ като химик в Института. Получила много добра основа още в престижния Техникум по индустриална химия "Проф. д-р Асен Златаров" - Димитровград и надградена във ВХТИ – София, тя с лекота се включи в научноприложните разработки. Бързо проличаха високата ѝ химическа култура, стабилни знания, експериментална сръчност, прецизност, отговорност. Преминаването ѝ към фундаментални изследвания доказва нейното израстване като научен работник чрез задълбочаване и разширяване на знанията си и осмисляне на получените резултати. Нейното развитие като водещ специалист в изясняването на връзката между методите на получаване, спектралните изследвания и каталитичното поведение продължи и след хабилитирането ѝ. Тя е желан и търсен участник от престижни научни колективи у нас и в чужбина. Специализациите в Италия, както и участието в международните проекти, безспорно разшириха и обогатиха нейната научна квалификация с възможността да използва модерна апаратура и методи. Пребиваването и в чужбина е свързано с изнасяне на лекции на семинари, свързани с дизайна на хетерогенни катализатори и активно подпомагане при изработването на тези на MS и PhD студенти. Нейната компетентност е използвана от много колеги в ИК, въпреки че официално доц. Табакова няма регистрирана педагогическа дейност.

По наукометрични данни тя далеч надхвърля изискванията на ЗРАСРБ и специфичните условия, приети от НС на ИК-БАН. Изброените научни приноси в една тематика с голяма актуалност показват, че тя е вече един утвърден и признат учен, креативна, задълбочена и трудолюбива, с отлични перспективи за по-нататъшно развитие. Подкрепям изцяло нейната кандидатура и препоръчвам на уважаемото жури да предложи на Научния съвет на ИК-БАН да избере доц. д-р Татяна Тодорова Табакова на академичната длъжност „професор” в ИК-БАН, която тя напълно заслужава.

19.07.2012 г.

Дал становището: