

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. д-р Михаил Михайлов – ИОНХ–БАН, член на научното жури

по конкурс, обявен в ДВ бр. 55 от 27.06.2023 г. за заемане на академична длъжност „доцент” в професионално направление 4.2 „Химически науки”, научна специалност „Химична кинетика и катализ”, тематично направление „Синтез и охарактеризиране на каталитични материали за обезвреждане на летливи органични съединения“ за нуждите на Лаборатория „Катализ за енергия и опазване на околната среда“,
Институт по катализ, Българска академия на науките

В конкурса за доцент участва само един кандидат - гл. ас. д-р Петя Цветанова Петрова, понастоящем служител в Лаборатория „Катализ за енергия и опазване на околната среда“ при Института по катализ към БАН.

1. Преглед на документите на кандидата

За участието си в конкурса д-р Петрова е представила всички необходими документи: (i) заявление; (ii) копие от обявата в ДВ; (iii) автобиография; (iv) диплома за образователната и научна степен „доктор”; (v) удостоверение за трудов стаж по специалността като „главен асистент“; (vi) списък, отпечатьци, превод на резюметата и списък на цитиранията на научните трудове за участие в конкурса; (vii) общ списък на научните трудове; (viii) справка за изпълнение на изискванията за заемане на академичната длъжност "доцент" в Института по катализ; (ix) справка за приносния характер на трудовете, включени в хабилитационния труд и извън него.

2. Кратки биографични данни за кандидата

Гл. ас. Петя Петрова завършва Химикотехнологичен и металургичен университет – София през 2003 г., специалност „Технология на неорганичните вещества”. През същата година започва работа като инженер-химик в ИК – БАН в Лабораторията, в която работи и до днес, но озаглавена тогава „Нови каталитични материали и наноразмерни катализатори”. На следващата година е зачислена като

докторант и през 2009 г. успешно защитава дисертация на тема „Злато-молибденови катализатори, нанесени върху CeO_2 и $\text{CeO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ за пълно окисление на бензен“ и получава от ВАК образователната и научна степен „доктор“.

През 2010 г. д-р Петрова е избрана за главен асистент. От 2011 до 2018 г. тя преминава през няколко краткосрочни специализации в Университета Билкент в Анкара (Турция), Кралския технологичен институт в Стокхолм (Швеция) и Института по наноструктурни материали в Палермо (Италия).

От 2017 г. досега, успоредно с изследователската работа в ИК-БАН, работи и като учител по „Химия и опазване на околната среда“, последно в едни от най-престижните гимназии в София, Първа Английска и 91-ва Немска. Тя често е ангажирана от Министерството на образованието и науката да оценява проекти за учебници по „Химия и опазване на околната среда“ за XI и XII клас.

3. Преглед на научната дейност на кандидата

Д-р Петя Петрова е съавтор в общо 47 публикации, които са цитирани над 360 пъти от други автори. Общият и H индекс по Scopus е 14.

В конкурса участва с 25 публикации по темата на конкурса, от които 8 бр. са публикувани в списания от най-високата категория Q1, 7 бр. в списания Q2, 4 бр. в списания Q3, 1 бр. в списание Q4 и 5 бр. в списания без Q, с отворен достъп и материали от конференции. Статиите са публикувани в реномирани специализирани издания като Applied Catalysis B: Environmental, IF 24.319 (2 бр.), Chemical Engineering Journal, IF 16.744 (1 бр.), Fuel, IF 8.035 (1 бр.), International Journal of Hydrogen Energy, IF 7.139 (1 бр.), Catalysis Today, IF 6.562 (2 бр.), Applied Catalysis A: General, IF 5.723 (1 бр.) и др. В 4 публикации д-р Петрова е първи автор, а в 12 е втори, което доказва значителния и принос в провежданите изследвания. Публикуването на резултатите в реферирани списания изключва наличието на некоректност или елементи на плагиатство в приложените за участие в конкурса материали.

Върху публикациите по конкурса са забелязани 240 цитата (без автоцитати), основно от чуждестранни автори, което безспорно доказва актуалността и високото ниво на изследванията, проведени с участието на д-р Петрова.

Оценките на кандидата по показатели, съгласно минималните изисквания на ЗРАСРБ и правилника за неговото прилагане, както и повишените критерии на Българска академия на науките и Института по катализ, са посочени в Таблица 1.

Анализът на количествените резултати от изследователската дейност показва, че д-р Петрова надвишава минималните изисквания, особено по отношение на цитиранията на научните трудове на кандидата. Справката е попълнена коректно и отчита точно изпълнението на всички показатели.

Таблица 1. Оценка на кандидата по показатели, съгласно минималните изисквания на ЗРАСРБ и правилника на ИК - БАН.

Показател	Точки ЗРАСРБ	Точки кандидат
А. Дисертационен труд "доктор"	50	50
В. Хабилюационен труд	100	150
Г. Научни публикации извън хабилюационния труд	220	262
Д. Цитирания	60	480
Общо	430	942

4. Анализ на основните научни приноси

Десет от публикациите, с които участва кандидатката, са включени в нейния хабилюационен труд, докато резултатите от останалите 15 публикации са обобщени в авторската справка. Тези научни публикации са основно в областта на екологичния катализ и изследват важни аспекти като влиянието на метода за получаване на материалите и търсят връзка между състава, структурата, текстурните характеристики, редокс свойствата и каталитичната активност.

4.1. Хабилюационен труд

Всички публикации, включени в хабилюационния труд (публикации № 1-3,5,15,19-22,24), напълно съответстват на тематичното направление на конкурса и са свързани с разработването на ефективни материали за обезвреждане на летливи органични съединения чрез каталитичното им изгаряне. Като моделна реакция основно е изучено пълното окисление на стабилната молекула бензен. В някои случаи са изследвани и окисленията на формалдехид (публ. № 1), метанол и СО (публ. № 20). Обекти на изследване са катализатори на базата на злато, кобалтов и цериев оксид. Интересът към златото като катализатор рязко нараства, след като е докладвана изненадващо висока активност на наноразмерни златни частички в

нискотемпературното окисление на СО. Смесеновалентният кобалтов (II,III) оксид с шпинелна структура сред преходнометалните оксиди проявява сравнително висока активност в каталитичното изгаряне на летливи органични съединения. Използването на CeO_2 като катализаторен компонент основно се дължи на лесното превръщане между Ce^{3+} и Ce^{4+} без при това да настъпват изменения в неговата флуоритна структура.

Основните научни приноси в хабилитационния труд могат да бъдат обобщени по следния начин:

В публикации № 3 и 5 е установено, че CeO_2 промотира каталитичната активност и стабилност на Co_3O_4 в пълното окисление на бензен (ПОБ). При това е показано, че когато прекурсорите на двата оксида се смесват механохимично в определено съотношение (30 мас.% CeO_2) се постигат най-добри резултати, поради формирането на напрегнати структури от Co_3O_4 и CeO_2 с повишена концентрация на дефекти и Co^{3+} на повърхността.

В публикация № 2 се обръща внимание, че дотирането на Co_3O_4 - CeO_2 с калий води до влошаване на редуцируемостта, текстурните характеристики и оттам на каталитичната активност в ПОБ.

Публикациите № 1, 2, 15, 19-22 и 24 са посветени на наноразмерни златни катализатори (2-3 мас.% Au), нанесени върху CeO_2 , обикновено комбиниран с кобалтов оксид, поради синергията между редокс свойствата на двата оксида.

Определени са ключовите фактори за висока активност в каталитичното изгаряне, включително размерът на златните частици, наличието на активен кислород в катализатора и активацията на бензенова молекула.

Установено е, че дотирането на носителя CeO_2 с преходнометални оксиди като Fe_2O_3 и MnO_x води до подтискане на каталитичната активност в ПОБ, въпреки повишената редуцируемост. Липсата на корелация между редуциционното и каталитично поведение в случая е обяснена с решаващата роля на активацията на бензена.

Показано е, че дотирането на Au/CeO_2 с Co_3O_4 води, освен до повишаване на каталитичната активност в ПОБ, и до получаване на катализатори, показващи висока активност в нискотемпературното изгаряне на метанол и СО.

Демонстрирани са предимствата на механохимичното смесване в сравнение със съутаяването при получаване на носител със състав 10 мас.% Co_3O_4 - CeO_2 . Това е

свързано с наличието на две фази - повърхностно модифициран с кобалт CeO_2 и отделна фаза от кобалтов оксид. Последната благоприятства както редуцируемостта на носителя, така и малкия размер на златните частици, което обяснява високата активност на катализатора в ПОБ.

Публикация № 2 показва потенциала за практическо приложение на златен катализатор, нанесен върху механохимично получен $\text{Co}_3\text{O}_4 - \text{CeO}_2$ (30 мас.% CeO_2). Този катализатор е синтезиран по лесен и екологосъобразен метод и проявява висока стабилност и пълна конверсия на бензен до CO_2 и H_2O при сравнително ниски температури, без да генерира странични, замърсяващи въздуха продукти.

В публ. № 1 е установено, че съчетаването на високо хидроксилно покритие и концентрация на дефекти при смесването на бьомит (алуминиев оксихидроксид) и цериево-кобалтов оксид води до получаването на подходящ носител за златни катализатори за обезвреждане на формалдехид при ниски температури, малко над стайната.

4.2. Публикации извън хабилитационния труд

Някои от публикациите извън хабилитационния труд също са посветени на каталитичното изгаряне на въглеводороди, включително бензен (публ. № 4,7,11,12,14,17) и пропен (публ. № 12), като изследванията са разширени и върху Pd и биметални Au-Pd катализатори. Най-общо приносите в случая са свързани с изясняване на влиянието на видът, количеството и метода на дотиране на носителя и природата на нанесените моно и биметални катализатори върху техните структурни, редокс и каталитични свойства.

Повечето от останалите статии също са за реакции от екологично значение, като селективното окисление на CO за фино почистване на водород за горивни клетки (публ. 6,8-10,13,18). От съществен интерес са следните резултати:

Добавянето на итрий към CeO_2 до определени малки количества подобрява селективността на нанесените златни катализатори и стабилността им в присъствие на вода и CO_2 . Изследванията показват, че импрегнирането с итрий има преимущество пред съутаяването, тъй като резултира в покриване на повърхността на CeO_2 с наночастици от Y_2O_3 и понижаване на нейната базичност. Също така, използването на Al_2O_3 като носител за подобни състави показва потенциал за получаване на катализатори за практическо приложение.

Дотирането на Au/CeO₂ с празеодим води до намалена конверсия на CO в работния температурен диапазон на горивните клетки (80-120°C), поради затруднено реокисление на повърхността, свързано със сегрегация на празеодимовия оксид.

Публикация № 16 се отнася до разработване на златни катализатори за редукция на азотен оксид с CO, които да могат да бъдат използвани по време на „студения старт“ на двигателите с вътрешно горене. Получен е златен катализатор, нанесен върху модифициран с Fe₂O₃ CeO₂, който показва висока активност, стабилност и селективност до N₂. Освен това, изследванията показват, че дотирането с желязо благоприятства конверсията на NO, но увеличава селективността до N₂O.

В публикация № 25 са изследвани катализатори за циклизация на 1,4-бутандиол като етап от получаването на противотуморни препарати. Изследването демонстрира, че добавянето на около 0.5 мас. % паладий към Co₃O₄/SiO₂ катализатора повишава редуцируемостта на коблатовия оксид, подобрява дехидрогенирането и допринася за значително повишаване на добива на 2,3-дихидрофуран.

5. Заключение

Научните изследвания на д-р Петя Петрова са съществен принос в разработването на ефективни катализатори с екологично значение на базата на научно обоснован подход. Резултатите са публикувани в престижни списания и са високо цитирани, което доказва тяхната актуалност и значимост. Анализът на количествените показатели на кандидатката показва, че те надхвърлят изискванията на ЗРАСРБ и Правилника на ИК – БАН към него. Ето защо с убеденост давам своята положителна оценка и препоръчвам на Научното жури и Научния съвет на ИК – БАН да гласува с „ДА“ за избора на гл. ас. д-р Петя Петрова на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. „Химически науки“, научна специалност „Химична кинетика и катализ“.

03.10.2023

София

Член на научното жури:

/проф. д-р Михаил Михайлов/