



ПРОФ. ДХН ГЕОРГИ Н. ВАЙСИЛОВ  
Президент на Федерацията на Европейските Зеолитни Асоциации (FEZA)  
Председател на Хумболтовия съюз в България

Софийски университет "Свети Климент Охридски"  
Факултет по Химия и Фармация, катедра "Органична химия"  
Бул. Дж. Баучер 1, София 1124, България  
Тел.: (+359 2) 81-61 338, Факс: (+359 2) 962-54-38  
E-mail: gnv@chem.uni-sofia.bg

---

## РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Георги Николов Вайсилов

Химически факултет на Софийския университет

по конкурса за доцент по професионално направление 4.2 „Химически науки”

(Химична кинетика и катализ)

за нуждите на лаборатория „Повърхности на дисперсни материали”

към Института по обща и неорганична химия, БАН,

с кандидат гл. ас. д-р Кристина Костова Чакърва

В конкурса за доцент участва само един кандидат - гл. ас. д-р Кристина Костова Чакърва, която работи в лаборатория „Повърхности на дисперсни материали” на Института по Обща и Неорганична Химия, БАН.

Кристина Чакърва е завършила Химическия факултет на Софийския университет през 2001 г. като Магистър по Химия със специализация „Неорганична и аналитична химия” с отличен успех от семестриалните изпити и държавния изпит. От 2003 г. тя е докторант в лабораторията по „Синтез и реактивоспособност на оксидни системи” на Института по Обща и Неорганична Химия и през 2006 г. защитава дисертация за научната и образователна степен Доктор по научната специалност „Химична кинетика и катализ”. Дисертационният труд е на тема „Некласически повърхностни карбонили и нитрозили на паладий и платина” с научни ръководители проф. Хаджииванов и проф. Клисурски. От 2006 г. тя е назначена за специалист-химик в лабораторията по „Синтез и реактивоспособност на оксидни системи”. От 2006 до 2009 г. тя специализира като пост-док (общо за 28 месеца) в две от водещите Европейски лаборатории в областта на спектралното характеризирание на оксидни повърхности – Лабораторията по реактивоспособност на повърхности на Университета Пиер и

Мария Кюри, Париж, Франция, и Департамента по Неорганична химия на Института Фритц Хабер, Берлин, Германия. От октомври 2009 г. тя е избрана за научен сътрудник/главен асистент в лаборатория „Повърхности на дисперсни материали” на Института по Обща и Неорганична Химия, БАН.

Научните приноси на гл. ас. Чакърва са публикувани в 22 научни статии в списания с импакт фактор и 4 публикации в списания без импакт фактор или сборници от конференции. Две от публикациите не са включени в материалите на конкурса, тъй като са по друга тематика. Статиите с импакт фактор са публикувани в международни научни списания с авторитет в областта на катализа и порестите материали като *J. Phys. Chem. C*, *Appl. Catal. A* и *B*, *J. Catal.*, *Micropor. Mesopor. Mater.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *J. Molec. Catal. A*, *Catal. Commun.*, и др. Съгласно приложената справка, към датата на подаване на документите за конкурса *h* индексът на гл. ас. Чакърва е 8 като публикациите и са цитирани 138 пъти, което е впечатляващо за етапа на научната и кариера. Основната част от цитатите са в международни списания или книги, както и в дисертации от чужбина (Германия, Франция, Бразилия, Италия, Испания, Унгария, Русия). Две от публикациите са цитирани в авторитетната годишна поредица на Кралското химическо дружество “*Spectroscopic Properties of Inorganic and Organometallic Compounds*”. Сред авторите, цитиращи работите на гл. ас. Чакърва, са водещи учени в областта на оксидните повърхности и хетерогенния катализ, *A. Zecchina*, *G. Busca*, *E. Rudner*, *J. T. Yates*, и др.

Резултати от изследванията са представени на 21 национални и международни научни конференции и симпозиуми, като 9 от представянията са с устен доклад (3 от тях изнесени от кандидатката) и 12 постера.

Деветнадесет от научните трудове на гл. ас. Чакърва, представени за участие в конкурса, са в съавторство с проф. Хаджииванов като част от работите са със съавтори от лабораторията или колеги от института. Значителна част от работите са в публикувани в съавторство с водещи научни групи от чужбина, включително и групите, в които кандидатката е специализирала. В публикациите, кандидатката е първи автор в 10, втори в 8, а в останалите е трети или следващ автор. Тъй като съм съавтор на една от публикациите (№ 21 от пълния списък с публикации) няма да оценявам приносите в тази работа, но ще я включа в общите наукометрични показатели на кандидатката. На основа на личните си впечатления

от гл. ас. Чакърова, смятам, че тя има съществен принос във всички научни публикации с нейно участие.

Научните публикации на гл. ас. Чакърова, представени за рецензия, включват експериментални изследвания на активни центрове (йони или малки частици от преходни метали, хидроксилни групи) в зеолити или върху оксидни повърхности. Основният експериментален метод, използван за тези изследвания, е инфрачервената спектроскопия на молекули-сонди, но в различните изследвания са използвани и други методи, подходящи за изучаваната система. Според изследваната система и конкретния научен проблем, публикациите на кандидатката могат да се класифицират в следните направления:

- ИЧ спектроскопско охарактеризиране на координационната ненаситеност и окислителното състояние на катиони на преходни метали в зеолитни и оксидни катализатори;
- Приложение на  $\text{OH} \rightarrow \text{OD}$  изотопен обмен за изучаване на повърхностни  $\text{OH}$  групи;
- Механохимичен синтез на катализатори.

Основната част от публикациите попадат в първото направление. По тази тематика са изследвани редица образци каталитични системи включващи паладиеви, платинови, никелови, кобалтови и златни йони или частици в различни зеолити или върху оксидни повърхности ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{FeO}_x$  и др.). Особено интересни са изследванията за идентифициране и модифициране на окислителното състояние на златни йони и частици, където е установено наличието не само на неутрални или положително заредени златни центрове, но и на злато с частичен отрицателен заряд. Тези форми са наблюдавани не само върху редуцируеми оксиди, но и върху силициев диксид.

Към това направление може да се отнесе и тематиката, свързана с разработването на методики за приложение на изотопно белязан въглероден оксид (по-специално  $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ ) за ИЧ спектроскопско идентифициране на повърхностни поликарбонилни структури. В част от най-новите публикации на гл. ас. Чакърова е предложена нова методика за изследване формирането на поликарбонилни комплекси на метални йони с използване на изотопно белязан  $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$  вместо използвания досега  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ . По този начин се преодоляват значителни пречки пред еднозначното идентифициране на три и поликарбонилните комплекси.

Изследванията по второто направление са публикувани в 4 публикации. Основните приноси в това направление са свързани с:

- изясняване на случаите на Ферми резонанс при повърхностни хидроксилни групи;
- особеностите на изотопното отместване при ОН/OD групи, когато съответна група участва във водородна връзка. След анализ на това отместване, то е предложено като алтернативен критерий за участие на групата във водородна връзка.

В третото направление са изследвани свойствата на каталитични образци, получени чрез механохимична обработка.

Оценявам високо изследванията, включени в публикациите, които са представени за рецензия. Представените изследвания са оригинални и са по темата на конкурса. Получените научни резултати могат да се отнесат към категориите новост за науката и обогатяване на съществуващите знания. Експерименталните резултати са описани и интерпретирани прецизно, направени са важни изводи за особеностите в поведението на изследваните образци в зависимост от типа на металния йон и носителя, както и от начина на получаване и обработка образца. Развитите нови методики за идентифициране на различните форми на металните йони и техните трансформации при различни условия могат да подпомогнат разработването на нови и подобряване характеристиките на съществуващи катализатори за очистване на промишлени газове и редица индустриални каталитични процеси. Методичните приноси на изследванията ще помогнат за точно определяне на броя лиганди в карбонилните комплекси и характеристиките на образуваните водородни връзки при повърхностни ОН групи.

Макар, че не се изисква от закона, би било полезно към материалите на конкурса да се добави текст за основните насоки и идеи за бъдещи научни изследвания на кандидатката след заемане на академичната длъжност “Доцент”.

Познавам кандидатката лично, както и от нейните научни публикации и представяния на научни форуми. Особено добри впечатления за нейната работа имам и от съвместни ни проекти с групата на проф. К. Хаджииванов, финансирани от фондация А. фон Хумболт и НФНИ. Личните ми впечатления от нея са много добри.

Пет от публикациите на гл. ас. Чакърва са включена в предходната процедура за доктор, а останалите 21 публикации не са включени в предходни процедури. Съгласно Закона за развитието на академичния състав, тези публикации могат да бъдат разглеждани като “публикации в специализирани научни издания, равностойни на монографичен труд” и “други оригинални научноизследователски публикации”, и са напълно достатъчни за удовлетворяване на изискванията на Закона.

В заключение, гл. ас. д-р Кристина Костова Чакърва отговаря на всички изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност Доцент:

- Придобила е образователната и научна степен доктор;
- Заемала е повече от 2 г. академичната длъжност главен асистент;
- Представила е публикации в специализирани научни издания, равностойни на монографичен труд;
- Представила е други оригинални научноизследователски публикации;

Освен това, кандидатката е изграден специалист в областта на химията на повърхностите и хетерогенните катализатори и приложението на ИЧ спектроскопия на молекули-сонди за тяхното детайлно изследване. Публикуваните научни резултати ясно показват, че кандидатката творчески прилага тези съвременни експериментални методи за решаване на конкретни изследователски проблеми и разработва нови методики за изследване. Въз основа на гореизложеното предлагам гл. ас. д-р Кристина Чакърва да бъде избрана за доцент в Института по обща и неорганична химия, БАН.

27.02.2012 г.

проф. дхн Георги Н. Вайсилов