

**ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ
БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ**

СТАНОВИЩЕ

ОТ ПРОФЕСОР ДН СЛАВЧО КИРИЛОВ РАКОВСКИ

за приносите на главен асистент д-р Кристина Чакърва,
в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент”,
по професионално направление 4.2 „Химически науки”

Главен асистент д-р Кристина Чакърва родена 1974 е завършила висшето си образование по химия в Химическия факултет на СУ “Св. Кл. Охридски” през 2001 с отличен успех. Тя защитава научната и образователна степен „доктор“ в Института по обща и неорганична химия, Българска академия на науките, през 2006. Темата на дисертацията и е: “Некласически повърхностни карбонили и нитрозили на паладий и платина” с научни ръководители: Проф. дхн Константин Хаджииванов и Акад. Димитър Клисурски. Работи в ИОНХ от 2006 и до сега. Тя е член на лаборатория „Повърхности на дисперсни материали”.

Главен асистент д-р Кристина Чакърва е единствен участник в обявения конкурс и се представя с 24 научни работи от общо 26, от които 23 в списания, включени в базата данни на ISI, 10 устни съобщения и 12 постера от участия в международни мероприятия у нас и в чужбина, член е на колективите на 3 проекта с външно за България финансиране на обща стойност около 860 х. евро и на 7 с финансиране от ФНИ на обща стойност около 4530 х. лева, 107 цитата от 138 и индекс на Хърш 8. Работи 1, 2, 5, 6 и 7 от списъка с публикации, представени за участие в конкурса, са включени в дисертационния труд за присъждане на образователната и научна степен „доктор”.

Наукометрията и напълно покрива изискванията на вътрешния правилник на ИОНХ за прилагане на ЗРАС, ЗРАС и Правилника за прилагането му.

Научната дейност и приносите на кандидата са свързани с прилагане на:

1. Метода на FTIR-спектроскопия за:
 - ❖ Изследване на повърхностни координационно ненаситени катиони;
 - ❖ Определяне на повърхностни поликарбонилни структури;
 - ❖ Повърхностни хидроксилни групи.
2. Механохимичен синтез на катализатори;

Системни изследвания са извършени в рамките на нейната докторската дисертация като са синтезирани нанесени паладиеви и платиновни катализатори върху различни оксидни и зеолитни носители, изяснено е валентното и координационно състояние на Pd^{n+} и Pt^{n+} йоните и влиянието им върху каталитичните свойства [1,2,5,6,7,9]. Чрез адсорбция на изотопна смес $^{12}CO-^{13}CO$ е доказано образуването на дикарбонили на Pd^{3+} , а при адсорбция на NO се образуват нитрозили на Pd^{2+} - потенциални междинни съединения при редукция на NO_x с въглеводороди. Регистрирано е образуване на смесени карбонил-нитрозилни комплекси на Pd^{2+} . Отбелязано е образуването на дикарбонили на Pt^{3+} йони нанесени върху зеолити и дикарбонилни комплекси на Pt^+ , които при високи покрития от CO преминават в трикарбонили. Методът на синтез на образците (йонен обмен или импрегниране) обуславя различни начини на свързване на платината със зеолитната решетка.

Чрез прилагането FTIR и метода на сондата (CO и NO или комбинация от тях) са изследвани никелови и кобалтови катализатори нанесени на различни подложки и са определени типовете центрове на повърхността. Труд (4), посветена на тези въпроси е наградена за най-добра работа с участие на млади учени от ИОНХ в направление „Адсорбция и катализ” за 2005 г.

Изследванията в направлението - синтез и охарактеризиране на нанесени златни катализатори са постигнати сериозни успехи в разбирането на механизма на действие в редокс-реакции на нанометричното злато, нанесено на различни подложки (10,11,12,14,15,21). Лесното окисление на златото до $Au^{\delta+}$ и Au^+ , наблюдавано в присъствие на смес от $CO+O_2$ дори при стайна температура, подкрепя хипотезата, че редокс двойките Au^+/Au^0 ($Au^{\delta+}/Au^0$) играят съществена роля при ниско температурно окисление на CO. Друг интересен момент е образуването на редуцирани златни центрове с отрицателен заряд ($Au^{\delta-}$) при увеличаване на времето на контакт на образеца с CO. Адсорбирайки CO, тези центрове формират различни линейни карбонилни комплекси, които са в състояние да конвертират един в друг. Предлагат се различна концепция за образуването на $Au^{\delta-}$ -центровете и се обсъжда тяхната роля в катализа. Потенциален интерес предизвикват изследванията за използване на TiO_2 за твърдофазна екстракция и прекоцентриране на желязо от морска вода.

Много интересни са изследванията с използване на изотопно белязан въглероден оксид за определяне на повърхностни поликарбонилни структури (16,20,22). Поликарбонилната структура на комплексите на Fe-ZSM-5 и Fe-BEA с CO е определена чрез адсорбция на изотопна смес $^{12}C^{16}O-^{13}C^{18}O$, което е и един от съществените приноси в изследванията на главен асистент д-р Кристина Чакърва. Провеждането на аналогични експерименти с двете изотопни смеси $^{12}C^{16}O-^{13}C^{16}O$ и $^{12}C^{16}O-^{13}C^{18}O$ ясно демонстрира, че

адсорбцията на изотопна смес, в която са белязани както въглеродният, така и кислородният атом, осигурява значително по-богата информация в сравнение с широко използваната конвенционална смес $^{12}\text{C}^{16}\text{O}-^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, като предотвратява припокриването на различните карбонилни ивици.

Намерената емпирична формула, свързваща честотите на ОН и ОD трептенията, позволява изключително точно пресмятане на честотата на трептене на ОН групите след деутериране. За пръв път факторът на изотопно отместване е предложен като критерии за определяне на участието на ОН групите във водородна връзка (17,18,19,23). Чрез използване на ОН \rightarrow ОD изотопен обмен е демонстрирано, че появата на две отместени ивици след адсорбция на СО и C_6H_6 (C_6D_6) има спектрален произход (Ферми-резонанс на отместените ОН трептения с второто възбудено състояние на $\delta(\text{OH})$), а не се дължи на хетерогенност на мостовите ОН групи. Това се потвърждава и от факта, че след адсорбция на $^{14}\text{N}_2$ ($^{15}\text{N}_2$), в спектъра на същия образец се наблюдава само една отместена ивица.

Част от работите на кандидата са свързани с прилагане на механохимично третиране при синтез на различни катализатори. Установено е, че образци синтезирани чрез механохимична обработка се характеризират със значително по-добра дисперсност.

Смятам, че научните и научно-приложните приноси на кандидата показват, че тя е усвоила, развила и приложила нови съвременни методи за анализ като FRIR, метода на зонда и използване на белязаните атоми за детайлно изясняване на механизма на каталитични реакции, анализ на повърхности и катализатори.

Приносите на главен асистент д-р Кристина Чакърова, в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“, по професионално направление 4.2 „Химически науки“ по своя обем и качество напълно съответстват на изискванията на Правилника на ИОНХ за прилагане на ЗРАС, на ЗРАС и Правилника за неговото приложение и главен асистент д-р Кристина Чакърова напълно заслужава да заеме академичната длъжност „доцент“ в ИОНХ. Призовавам уважаемите членове на НЖ да гласуват положително и НС на ИОНХ да утвърди изборът и за „доцент“.

София, 22.02.2012

ПОДПИС:

/Проф. дн С. Раковски/