

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за ДОЦЕНТ
по научна специалност 4.2 Химически науки (Физикохимия),
обявен в ДВ бр. 35 от 08.05.2012 г.
за нуждите на катедра „Физикохимия” на ХТМУ

Рецензент: доц. д-р инж. Ангелина Константинова Попова
катедра „Химия”, ТУ- София

Единствен кандидат в обявения конкурс е д-р инж. Грета Веселинова Радева,
главен асистент в катедра „Физикохимия” на ХТМУ

1. Биографични данни за кандидата, научни интереси и педагогическа дейност.

Д-р Грета Радева е родена на 18.01.1967 г. в София. Висшето си образование завършва през 1990 г. в Химикотехнологичния и металургичен университет като магистър инженер-химик по специалността „Химична технология на дървесината”. През 1999 г. постъпва като редовен докторант в катедра „Физикохимия” на ХТМУ. През 2004 г. успешно защитава дисертация на тема: „Кинетика и равновесие на адсорбционни и химични процеси в системите целулоза – лактаза и целулоза – оптически избелител” по научната специалност 01.05.05 Физикохимия. През 2005 г. тя е избрана за главен асистент в катедра „Физикохимия”.

Научните интереси на гл. ас. д-р Г. Радева са в областта на кинетиката на хетерогенните процеси, адсорбционните и химични процеси, протичащи върху нееднородни повърхности, и ензимна кинетика.

Д-р Радева е имала значително учебно натоварване. Още като докторант на нея е възлагано воденето на хонорувани упражнения по „Физикохимия” и „Колоидна химия”. Като главен асистент тя е работила със студенти от различни специалности. Водила е лабораторни и изчислителни упражнения с бакалаври редовно и задочно обучение и с магистри. След обучение в Гьоте-институт през 2009 г. получава сертификат за владение на немски език „С1” ниво, което и дава възможност да води занятия на немската специалност на ХТМУ (III курс с обучение на немски език, ОКС „бакалавър”). Член е на немския езиков център от 2009 г.

Възлагани са ѝ 6 лекционни курса за периода 2008 – 2012 г.: четири лекционни курса по дисциплината „Физикохимия” и „Физикохимия I” за студенти задочно обучение ОКС „бакалавър” (II курс, специалности МЗ и МТ и АИТ и ИМ; III курс, специалност ОТ и НТ) и два курса по дисциплината „Химична кинетика и катализ” за студенти редовно обучение ОКС „магистър”, I курс. Общият хорариум на лекционните курсове 136 часа. От тях 106 часа са четени през последните три години.

Гл. ас. д-р Г. Радева е разработила учебна програма за дисциплината „Равновесие и кинетика в хетерогенни системи” за ОКС „доктор”. Заедно с доц. д-р Михай Христов участва в разработването на учебна програма по дисциплината „Химична кинетика и катализ” за ОКС „магистър”.

Въпреки голямата си натовареност като преподавател, д-р Радева намира време и се включва в научните форуми, организирани от ХТМУ – член е на Комисията за оценка на научната постерна сесия за студенти, докторанти и млади учени (2007 и 2008 г.) и на Комисията за оценка на ученически есета (2011 и 2012 г.). Член е на групата по кандидат-студентски дейности (от 2010 г.), на Общото събрание на ХТМУ, на Съвета на Департамента по химични науки (от 2005 г.) и е отговорник по учебната работа на катедра „Физикохимия” (от 2010 г.)

2. Научноизследователска работа. Характеристика и оценка на научните приноси.

Научноизследователската работа на кандидатката, съответните публикации и научните приноси са обобщени тематично в четири групи.

Тематика на **първата** група изследвания са *термодинамичните и кинетични особености на хемисорбционни процеси, протичащи върху нееднородни повърхности*. Основават се на 5 публикации. Обект на изследване са различни видове целулоза и оптични избелители. Последните се използват все по-често, тъй като с тях се постига блестяща белота на хартията, която не може да се постигне с нито един от известните химични методи на избелване. Оптичните избелители са водоразтворими органични съединения и се разглеждат като флуоресцентни багрила, които излъчват повече видима светлина, отколкото могат да отразят. Тези обекти на изследване определят практическата насоченост на научните достижения. Теоретичните аспекти на изследванията и научните приноси включват извеждането на нови, оригинални форми на експоненциалното кинетично уравнение, за което е известно, че описва кинетиката на процеси, протичащи върху равномерно нееднородна повърхност. Повърхността на целулозата е равномерно нееднородна и това позволява приложението му. Кинетичният коефициент на нееднородност в уравнението е свързан с термодинамичния коефициент на нееднородност и отчита влиянието както на енергетични, така и на ентропийни фактори. Предложени са и различни форми на уравнението, които могат да се използват за хетерогенни процеси, протичащи с химичен контрол (химична делигнификация на целулоза с лактозо – медиаторна система) или с адсорбционен контрол (адсорбция на оптичен избелител върху целулоза).

Изследвани са термодинамични аспекти на адсорбцията на оптичните избелители Tironal UP и Leucophor AP върху предварително делигнифицирана иглолистна целулоза. Варирана е концентрацията на избелителя и температурата. Термодинамичното равновесно състояние в началните моменти на процеса при степени на запълване на повърхността $\theta \rightarrow 0$ се подчинява на адсорбционната изотерна на Тьомкин. Коефициентът на нееднородност f на изотермата отчита

влиянието на степента на енергетична нееднородност. При наличие на хемисорбционен процес, съпроводен с промени в структурата на повърхността се наблюдава значителна промяна на ентропията на адсорбента. Изчислен е коефициентът на нееднородност и е установено, че не зависи от температурата. Този факт показва, че повърхността на целулозата се характеризира само с ентропийна нееднородност. Изчислена е стойността на равновесната адсорбционна константа. Стойността на изменението на ентропията оказват приоритетно влияние върху получените стойности на енергията на Гибс.

Подробно е изследвана ролята на ентропийния фактор върху адсорбцията за системата оптичен избелител – целулоза. Адсорбционният процес е изучен и при средни степени на изследване на повърхността. Установено е намаляване на ентропията с увеличаване на адсорбираното количество избелител. Това показва, че в хода на адсорбционния процес нарастват стеричните затруднения, свързани с достъпността на адсорбционните центрове върху целулозната повърхност. Установено е, че избелителя Leucophor AP е по-перспективен, тъй като има по-голям афинитет към целулозната повърхност и при него ентропийната нееднородност е по-малка.

Безспорен принос в изследователската работа е извеждането на нова корелация между текущата скорост и равновесната константа при една и съща степен на запълване на повърхността. Това е постигнато чрез търсена на корелации между кинетични и термодинамични характеристики на хемисорбционни процеси, при които освен енергетична е установена и ентропийна нееднородност. Използван е модел за равномерно нееднородни повърхности, чиито активни центрове върху повърхността са линейно разпределени по отношение на тяхната реакционна енталпия. Това разпределение е валидно за повърхности с еднакъв брой различни по адсорбционна способност центрове. Намерена е линейна корелация между енергетичните характеристики (активираща енергия и адсорбционна енталпия), както и между ентропийните характеристики (предекспоненциален множител и изменение на ентропията). Комплексният ефект на енергетични и ентропийни фактори се разглежда като компенсационен ефект. Намерените корелации са потвърдени експериментално за три различни хемисорбционни процеса:

хемисорбция на оптичен избелител върху целулоза; хемисорбция на Fe^{3+} и Cu^{2+} върху влакнест полиамфолит; хемисорбция на хидролизиран модифициран полиакрилнитрил върху целулоза.

Втората група изследвания са върху *кинетиката на делигнификационното действие на лаказо – медиаторна система*. Основава се на 3 публикации. Изследвано е влиянието на времето и концентрацията при делигнификация на целулоза със системата ензим Laccase NS51003 и медиатор 1-хидроксibenзотриазол. Намерена е зависимост между предекспоненциалния фактор и количеството на ензима. Изведено е уравнение, което свързва степента на делигнификация с времето, температурата и концентрацията на ензима.

Изследвано е и влиянието на горната лаказо-медиаторна система върху последващо третиране на образците с хлорен диоксид и кислород. Установено е, че ефектът на ензимно действие върху делигнификацията е по-силно изразен след обработване с ClO_2 . Началните и текущите скорости на избелване са по-високи при комбинацията $\text{LMS} + \text{O}_2$. Въз основа на тези резултати е направено кинетично изследване и е потърсена корелация между кинетичните характеристики на процесите на делигнификация и избелване. Използвани са приближени форми на експоненциалното кинетично уравнение.

Третата група изследвания са върху процеси, свързани с *целулазна ензимна хидролиза*. Основава се на 11 публикации. Тези изследвания имат важна практическа насоченост поради растящото производство и използване на биогорива от второ поколение, получени от целулоза и отпадъчни лигноцелулозни материали. Изследвана е кинетиката на ензимна хидролиза. На ензимно третиране е подложена избелена широколистна целулоза с целулазен ензимен продукт FiberCare. Изследвано е влиянието на температурата и концентрацията. Установено е, че процесът се описва най-добре с експоненциално кинетично уравнение. Нарастването на активиращата енергия в хода на процеса е обяснено с конформационни изменения в ензимната молекула и намаляване на неговата активност. Установено е наличие на компенсационен ефект. Намерена е зависимост между нарастването на началната скорост на процеса и концентрацията на ензима. Кинетични изследвания на процеса ензимна хидролиза са проведени и с киселинно

хидролизирана царевична растителна суровина и два ензимни продукта.

Кинетичните данни са компетентно интерпретирани.

Изследвано е адсорбционното равновесие и кинетичната зависимост на адсорбцията на системата предварително избелена целулоза и целулазен комплекс, който разгражда целулозния материал до глюкоза, целобиоза и глюкозидни остатъци. Получените адсорбционни изотерми се описват с изотермата на Тьомкин за равномерно нееднородни повърхности. Изчислени са стойностите на термодинамичния коефициент на нееднородност, равновесната константа, топлините на адсорбция и изменението на енталпията на процеса. Проследено е влиянието на количеството лигнин върху процеса на адсорбция на ензима целулаза за три типа широколистна целулоза: избелена, след кислородна делигнификация и неизбелена. Изследвана е термодинамиката и кинетиката на адсорбционния процес.

Направено е сравнително изследване на различни методи за предварителна обработка на лигноцелулозни материали от отпадъчни агрокултури (пшенична слама и царевични стъбла) и биомаса от бързорастящото широколистно дърво пауловния с цел повишаване на последващия ефект от ензимната хидролиза. За ефекта от третиранията се съди по полученото количество редуциращи захари. Определени са най-подходящите условия за ензимно третиране на тези видове целулоза. Експерименталните резултати могат да послужат за създаване на оригинална технология за продукция на биоетанол от второ поколение.

Изследвана е кинетиката на предварителна обработка с разредена сярна киселина и чрез паровзривен метод, както и кинетиката на последваща ензимна хидролиза на биомаса от пауловния; кинетиката на ензимната хидролиза на растителна суровина от пшенична слама след предварителна обработка по паровзривен метод. Получено е общо уравнение, което описва зависимостта на степента на хидролиза от променливите в хода на процеса: времето, концентрацията на ензима и температурата. Практическото значение на това уравнение се изразява във възможността да се предвиди степента на хидролиза при предварително подбрани температура, време и количество ензим.

Последните научни изследвания на кандидатката са в областта на **термичното стареене на различни видове влакнести материали**. От направеното кинетично

изследване е установено, че процесът на стареене, който представлява реакции на изменение и деструкция на целулозните вериги, най-добре се описва с експоненциално кинетично уравнение. Намерено е, че образците с по-ниско съдържание на лигнин стареят по-бавно, което води до по-малко намаляване на тяхната белота.

Въз основа на разгледаните безспорни приноси от теоретично и приложно естество, бих искала да открия като особено значим извеждането за пръв път на оригинална корелация между текущата скорост и равновесната константа при една и съща степен на запълване на повърхността.

3. Структура на публикациите и забелязаните цитати.

Тази значима изследователска работа е отразена в 20 публикации, от които: в чуждестранни и международни списания с импакт фактор – 8 броя; в международни специализирани списания без импакт фактор – 1 брой; доклади в сборници на международни конференции, отпечатани в пълен текст с редактор – 7 броя; в български списания без импакт фактор 4 броя.

В 17 от работите кандидатката е първи автор; в 1 – втори автор; в 1 – пети автор и в 1 – шести автор.

Д-р Радева има още 15 доклади на международни конференции с публикувано резюме. Сумарно, всички публикации, с които тя участва в конкурса за „доцент” са 35 броя.

При отчитане на броя на публикациите, представени за участие в конкурс за придобиване на академичната длъжност „доцент” **не** са включени публикации, използвани за придобиване на образователната и научна степен „доктор”.

Върху публикациите, представени за придобиване на академичната длъжност „доцент” са забелязани осем цитата, от тях 5 от чуждестранни и 3 от български автори. Голяма част от публикациите на кандидатката са направени през последните три години и тяхното цитиране предстои. (публикациите, използвани за придобиване на ОКС „доктор” имат 13 цитата).

Д-р Радева участва като съавтор в едно учебно помагало.

4. Оценка на учебното помагало, представено в конкурса.

Представеното „Ръководство по физикохимия” на немски език с автори Е. Клайн и Г. Радева е съставено от седем глави: Математични процедури (грешки, обработка и представяне на експериментални резултати); Молекулни спектри, молекулна рефракция; Калориметрия; Фазови равновесия; Повърхностни явления; Химично равновесие; Химична кинетика. Съдържанието му е съобразено с учебната програма за студенти ОКС „бакалавър” от специалността „Химично инженерство” с преподаване на немски език. Написано е компетентно. Неговото появяване безспорно е нужно за студентите от немската специалност.

5. Допълнителни показатели от дейността на кандидата по чл.42 ал.2.

Освен четенето на лекционни курсове и разработването на учебни програми, което беше подробно отбелязано в т.1, кандидатката е била ръководител на 4 вътрешни научноизследователски проекта към НИС на ХТМУ.

6. Заключение.

Направеният преглед на работата на д-р Г. Радева като преподавател и изследовател показва категорично, че тя е подходящ кандидат за академичната длъжност, за която кандидатства. В състояние е да поема голямо учебно натоварване и да извършва задълбочени, системни изследвания на високо научно ниво. Компетентността и наукометричните показатели на публикациите ѝ надхвърлят изискванията на Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в ХТМУ и на ЗРАС. Затова си позволявам да препоръчам на членовете на Научното жури да предложи на Съвета на Департамента по химични науки да гласуват положително за заемането на академичната длъжност „доцент” по научната специалност 4.2. Химични науки (Физикохимия) от гл. ас. д-р инж. Грета Радева.

София, 30.08.2012 г.

РЕЦЕНЗЕНТ:

