

9. Авторска справка за научните приноси в публикациите

На гл. ас. д-р Христина Лазарова

Кандидат по конкурс за заемане на академична длъжност „Доцент“ по Област 4. Природни науки, математика и информатика, Професионално направление 4.4 Науки за Земята (Минералогия и кристалография – експериментална минералогия) за нуждите на направление „Структурна кристалография и материалознание“ в ИМК-БАН.

- I. Обобщена информация за статиите и цитиранията на Христина Илиева Лазарова- източник Scopus.

Научни публикации по вид:

общ брой научни публикации по конкурса за „доцент“ – 18,

общ брой цитирания на публикациите (без самоцитати) – 259, използвани за конкурса - 27.

1. Публикации в издания, индексирани в WoS, Scopus, ERIH+ -
 - Попадащи в категория Q1 – 9 [1, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 15, 18] *
 - Попадащи в категория Q2 – 8 [3, 4,5, 7, 13, 14, 16, 17]
 - Попадащи в категория Q3 – 0
 - Попадащи в категория Q4 – 1 [2]
2. Научни публикации в български научни списания – 1
3. Научни публикации в международни научни списания – 17

Авторски позиции в научните публикации:

Първи автор – 2

Съавтор (втори и следващ автор) – 16

Всички 18 научни публикации представени по конкурса са на английски език.

Индекс на Хирш (*h-index*) – 12 (Според Scopus)

* С квадратни скоби [] са означени номерата на статиите съгласно списъка на публикациите (документ 6)

- II. Справка за оригиналните научни приноси (Авторска справка за научните приноси в публикациите и цитиранията след придобиването на образователната и научна степен „доктор” и на научната степен "доктор на науките") (съгласно критерий В.4 и критерий Г.7, Таблица 2 от документ №16. Справка за изпълнение на минималните критерии съгласно Приложение № 1 (ППЗРАСРБ) и Приложение № 2 (Правилник БАН) по научна област 4.4 „Науки за Земята“).

Критерий В.4 (Хабилитационният труд) е представен от общо 6 научни публикации (№№ В4.1-В4.6, две попадащи в Q1 квартал, три попадащи в Q2 квартал и една попадаща в Q4 квартал, общо 122т.), а **Критерий Г.7**. (Публикации извън хабилитационния труд) е представен от общо 12 публикации (№№ Г7.1-Г7.12, общо 275 т.).

Настоящата справка представя оригиналните научни приноси на гл. ас. д-р Христина Лазарова в областта на минералогията, кристалографията и материалознанието, обобщени въз основа на публикуваните научни трудове, включени в хабилитационния труд и допълнителните рецензирани публикации (с акцент върху публикации по **Критерии В.4**).

Всички публикации са свързани с темата на конкурса „**Минералогия и кристалография – експериментална минералогия**“. Публикациите са групирани в четири основни тематични направления, в които са разгледани нови катализатори, функционални материали, устойчиви процеси за оползотворяване на отпадъци и разработки с практическо приложение в зелената химия и екологията. Във всяко направление са обобщени целите, използваните методи, основните резултати и приноси за съответната научна област.

- 1. Разработка на фотокаталитични материали на базата на зеолито подобни и MOF структури - №№ В4.1, В4.3, В4.4 и В4.6**
- 2. Катализатори за устойчиво преобразуване на отпадъци от биомаса - №№ В4.5, Г7.4 и Г7.6**
- 3. Оползотворяване на циментов прах, летяща пепел и зеолито подобни за улавяне на CO₂ и оксидация на VOCs - №№ В4.2, Г7.5, Г7.7, Г7.8, Г7.9, Г7.10, Г7.11 и Г7.12**
- 4. Органичен синтез и функционализация на наноматериали с биологично и каталитично приложение -№№ Г7.1, Г7.2 и Г7.3**

- II. **1. Преглед на публикациите, свързани с Разработка на фотокаталитични материали на базата на зеолито подобни и MOF структури - №№ В4.1, В4.3, В4.4 и В4.6**

Багрилата са органични съединения, широко използвани за трайно оцветяване на различни материали поради своята устойчивост на външни въздействия. Към днешна дата са познати над 100 000 търговски багрила, с годишно производство, достигащо до 1 милион тона. Те намират приложение в множество индустрии, сред които най-голям потребител е текстилната промишленост. Въпреки широката им употреба, багрилата представляват сериозен екологичен проблем. Отпадъчните води от текстилната,

кожарската и други индустрии съдържат значителни количества токсични и трудно разградими багрила, които могат да замърсят водни екосистеми.

При проведените изследвания е разработена серия от нови фотокатализатори на основата на зеолито подобни материали от тип ETS-4 и ETS-10, като част от Ti центрове са заменени с Zr [публикации № В4.1 и № В4.3]. Основната цели са повишаване на структурната стабилност и фотокаталитичната активност на материалите чрез модификация на скелета на порестите ETS, реализирана посредством частична замяна на титановите центрове със Zr по време на синтеза на материалите. Резултатите показват съществено подобрене в стабилността и фото каталитичната ефективност на получените материали при фоторазграждане на устойчиви багрила като Crystal Violet и Methylene Blue, като при употреба на UV лъчение (облъчване) се отчита над 90% разграждане в рамките на по-малко от 60 минути. Моделните кинетичните изследвания сочат, че процесът следва псевдо-втори порядък, което предполага повърхностно-контролирана реакция. Катализаторите са обстойно охарактеризирани с помощта на XRD, SEM, FTIR, UV-Vis и BET/SSA анализи. Синтезиран е и нов цинк базирана метал-органична мрежа (metal organic framework - MOF) (MOF-S1), получен чрез солвотермална реакция между 2,4,6-трис-(4-карбоксфенокси)-1,3,5-триазин (TCPT) и цинков нитрат [публикация № В4.4]. Структурата е решена и уточнена чрез монокристална и „потвърдена“ чрез прахова рентгенова дифракция, разкриваща тригонална, двумерно преплетена 3D мрежа с ултрамикропореста морфология (среден диаметър на порите ~6.5 Å и Лангмюир повърхностна площ от 711 m²/g, Изотерма и модел на Лангмюир за адсорбция). MOF-S1 демонстрира висока адсорбционна способност спрямо различни органични багрила, като Congo Red, Methylene Blue, Methyl Orange и Rhodamine B. При UV облъчване се наблюдава до 93% фоторазграждане на Methyl Orange и 74% на Rhodamine B. Изследвано е също така влиянието на постсинтетично флуорно третиране върху порестата структура и каталитичната активност на зеолит морденит, синтезиран по метод без използване на органични структуро-определящи агенти (OSDA-free) [публикация № В4.6]. Модификацията е извършена с HF и NH₄F, като целта е повишаване на порьозността и улесняване достъпа до активните киселинни центрове, без значителна промяна в Si/Al съотношението. Характеризацията е извършена чрез XRD, N₂ адсорбция, SEM, HR-ТЕМ и твърдофазен NMR. Каталитичната активност е оценена чрез реакцията на изомеризация на *m*-ксилен, при което всички третирани с HF или NH₄F проби показват значително повишена активност спрямо немодифицирания материал. Това се обяснява с подобрената пореста структура и улеснения достъп до киселинните активни места/центрове.

Получените резултати имат широк спектър на приложение в съвременни технологии за пречистване на води и третиране на отпадъчни води, като допринасят за разработване на устойчиви и екологично ефективни решения за разграждане на токсични органични замърсители.

II. 2. Преглед на публикациите, свързани с Катализатори за устойчиво преобразуване на отпадъци от биомаса - №№ В4.5, Г7.4 и Г7.6

В последните години развитието на ефективни катализаторни системи за трансформация на отпадъчни материали и биомаса в ценни химикали и енергийни източници придобива все по-голямо значение. В тази връзка, едно от перспективните направления е използването на зеолито подобни катализатори за добив на водород от полиолефинови отпадъци, които представляват сериозен екологичен проблем. В

публикация [№ В4.5] е представен иновативен подход, при който различни видове зеолити– Beta, Faujasite, Mordenite и ZSM-5 – импрегнирани с никел, успешно катализират термичното разграждане на полиетилен (LDPE). Резултатите демонстрират значително понижаване на температурата на разграждане до около 250°C и висок добив на водород, достигащ до 50 % в газовата фаза. Освен добива на водород, каталитичната активност води и до селективно образуване на различни органични продукти – ароматни съединения, разклонени алкани и алкилбензени – като ключов фактор за ефективността е именно присъствието на никел. Друг важен акцент в устойчивата химия е синтезът на биоразградими алкохоли с индустриално значение чрез зелени каталитични процеси. В публикация [№ Г7.4] се представя успешната разработка на процес за получаване на пентан-1,2,5-триол посредством газофазна хидрогеноция на фурфурилов алкохол. Използването на мезопорести силициеви катализатори, модифицирани с никел и платина, осигурява отлична селективност и пълна конверсия при меки условия, без разрушаване на фурановото ядро. Този процес се отличава не само с висока ефективност, но и с екологична и икономическа приложимост, отговаряйки на принципите на зелената химия. В допълнение, производството на биодобавки за горива от възобновяеми суровини е друга област с голям потенциал. В публикация [№ Г7.6] е разгледан процес за каталитична етерификация на 5-хидроксиметилфурфурал (5-HMF) с *t*-бутанол, целящ получаването на 5-(*t*-бутоксиметил)фурфурал (*t*-BMF) – биодобавка, който подобрява характеристиките на горивата. Скринингът на множество киселинни катализатори довежда до избора на Preyssler-тип хетерополикиселина и модифициран монтморилонит (CLOI_CSP) като най-ефективни системи. Оптимизираните параметри позволяват постигането на над 95% селективност и висока производствена скорост в непрекъснат режим, което свидетелства за добрата технологична приложимост на процеса. Тези изследвания не само обогатяват познанията за каталитичните трансформации, но и отварят нови перспективи за устойчиво използване на отпадъчни материали и възобновяеми ресурси с минимален екологичен отпечатък. Съчетаването на модерни катализаторни технологии с принципите на зелената химия е ключът към бъдещето на индустриалните процеси и опазването на околната среда.

III. 3. Преглед на публикациите, свързани с Оползотворяване на циментов прах, летяща пепел и зеолито подобни за улавяне на CO₂ и оксидация на VOCs - №№ В4.2, Г7.5, Г7.7, Г7.8, Г7.9, Г7.10, Г7.11 и Г7.12

В рамките на интензивните проучвания за устойчива употреба на индустриални отпадъци, „летящата“ пепел (fly ash - FA) от топлоелектрически централи, използващи лигнитни въглища, се оказва ценен ресурс за синтез на функционални зеолито подобни материали. Изследванията демонстрират възможността за превръщане на този отпадъчен материал във високоефективни катализатори и адсорбенти, способни да допринесат за намаляване на замърсяването и оптимизиране на енергийните процеси. В публикация [№ Г7.5] са изследвани зеолитни катализатори, произведени чрез различни синтетични техники върху пепел от ТЕЦ „Марица-Изток“. Получените Na-X зеолито подобни притежават смесена микро-мезопореста структура и значителна специфична повърхност (116–396 m²/g). Модификацията с 5% Cu чрез импрегнация с меден ацетилацетонат значително повишава каталитичната активност при пълна оксидация на смес от летливи органични съединения (VOCs) – *n*-хексан, ацетон, толуен и дихлорбензен. Повърхностната дисперсия на мед и присъствието на желязо в

структурата играят ключова роля за подобряване на реакционните характеристики. В публикация [№ Г7.7], е представена разработка на „двойно функционални“ материали, които едновременно абсорбират CO₂ и катализират окислението на (VOCs)- летливи органични съединения. Серия FA, получени чрез хидротермална и термо-хидротермална обработка, съдържат Fe³⁺/Fe²⁺ йони и желязни оксиди, които осигуряват ефективна адсорбция на въглероден диоксид. Допълнителна модификация с 6% Co повишава каталитичната активност за окисление на замърсители. Резултатите подчертават значението на степента на зеолитизация и валентното състояние на желязото за постигане на висока ефективност. Изследвано е и влиянието на структурата на алуминиевия носител върху каталитичната активност на Cu-Fe/Al₂O₃ катализатори за пълно окисление на толуен – летливи органични съединения (VOC) в публикация [№ Г7.11]. Разработени са катализатори, използващи различни прекурсори на Al₂O₃ (байерит, псевдобемит и даусонит), с цел да се проследи как структурният ред и разпределението на активните компоненти влияят върху каталитичната ефективност. В публикация [№ Г7.8] се описва методика за производство на зеолито подобни наноконпозити от летяща пепел, с висока химична и термична стабилност. Тези материали съдържат нанокристални желязни оксиди и естествени примеси от метали като Cu, Co и Mn, което ги прави приложими като катализатори в термоокислителни процеси, адсорбенти за CO₂, антикорозионни покрития и заместители на критични суровини в различни индустриални приложения. Обобщение на напредъка в използването на пепели за зелени енергийни технологии е направено в публикация [№ Г7.9]. Там са анализирани структурните характеристики и устойчивостта на FA, получени по различни алкални процедури. Модификация с CuO допълнително подобрява каталитичната активност, а разработените тънки филми от FAZ показват потенциал за сензорни приложения при газова фаза. В публикация [№ Г7.10] е сравнено влиянието на съдържанието на калций върху свойствата на Na-X и Na-Ca-X зеолито подобни, синтезирани от летяща пепел. Изследването подчертава, че калциевите компоненти подобряват стабилността и сорбционния капацитет на материалите при влажни условия, което ги прави подходящи за улавяне на CO₂ в реални индустриални газови потоци. Плазмената повърхностна модификация на зеолито подобни получени от летяща пепел от въглища (CFAZ) чрез микровълново облъчване с CHF₃ и SF₆ газове, представена в публикация [№ Г7.12], показва значително повишаване на каталитичната активност за окисление на толуен. Този подход предлага алтернатива на скъпите платинови катализатори, насърчавайки прилагането на евтини и екологично съобразни материали в духа на кръговата икономика. Допълнително, потенциалът на циментов отпадък за улавяне и съхранение на CO₂ чрез минерална карбонизация е демонстриран в публикация [№ В4.2]. Резултатите подкрепят възможностите за интегриране на този отпадък в технологии за климатична устойчивост.

В заключение, серията проучвания върху катализатори и адсорбенти, базирани на летяща пепел и други индустриални отпадъци, предоставя солидна научна основа за развитие на иновативни и устойчиви материали с широк спектър от приложения в опазване на околната среда и зелена енергетика.

IV. 4. Преглед на публикациите, свързани с Органичен синтез и функционализация на наноматериали с биологично и каталитично приложение -№№ Г7.1, Г7.2 и Г7.3

През последните години са постигнати значителни успехи в разработването на нови каталитични системи и функционални наноматериали, насочени към устойчиви и екологично съобразни технологии. В публикация [Г7.1] е описан иновативен подход за селективно окисление на 5-хлорометилфурурал (CMF) до 2,5-диформилфуран (DFF) – ключов биологично възобновяем мономер, перспективен за синтез на нови полимери. Изследвани са разнообразни окислителни методи за нагряване, като особено впечатляващ е резултатът при използване на система PNO/Cu(OTf)₂ в ацетонитрил, активирана чрез микровълново нагряване (160°C, 5 мин), при която се постига добив от 54% DFF. Отчита се и потенциалът на хетерогенни Cu-катализатори, приложими в непрекъснат поток, които демонстрират висока селективност и възможност за многократна употреба, което допринася за устойчивостта и икономичността на процеса. В следващо изследване, публикувано в публикация [Г7.2], е представен синтезът на наноматериали на базата на сребърно-модифицирани порести силикати MCM-41 и SBA-15, използвани като носители на прополис с потенциални антимикробни свойства. Сребърните наночастици с размери 5–15 nm са успешно депозираны в порите и по повърхността на силикатите, стабилизирайки се в структурата. Тези резултати отварят път за разработка на нови дермални формулировки с подобрени лечебни свойства. Изследване публикувано в публикация [Г7.3], се фокусира върху каталитичната активност на SnO₂/зеолитни материали при естерификация на левулинова киселина. Катализаторите, базирани на природния клиноптилолит, модифициран със SnO₂ (TONCL) и сулфатиран SnO₂ (STONCL), демонстрират висока ефективност и стабилност. В частност, STONCL постига пълна конверсия на левулиновата киселина при синтез на етил- и октил- левулинати, благодарение на повишената концентрация на Brønsted и Lewis киселинни центрове. Катализаторите запазват висока активност след многократни цикли, въпреки че се наблюдава частично запушване на порите, което може да бъде контролирано и оптимизирано при бъдещи изследвания.

Оригиналните научни приноси на гл. ас. д-р Христина Лазарова са съсредоточени в областта на материалознанието и хетерогенната катализа, като основният фокус е върху създаването на нови функционални материали, съчетаващи иновативност, устойчивост и приложимост в контекста на съвременната кръгова икономика. Извършени са синтези на различни порести носители като SBA-15, SBA-16, MCM-41, KIT-6 и TS-1, както и техни модификации с преходни метали (Cu, Ni, Pt, Co, Ag, Mn, V), включително и при създаването на бифункционални катализатори. Проведени са широк набор от физикохимични анализи, включително прахов рентгенов анализ, азотна физисорбция, термогравиметричен и калориметричен анализ, температурно-програмирана редукция и УВ-ВИС спектроскопия. Оценена е каталитичната активност на материалите в процеси като изомеризация на ароматни съединения, пълна оксидация на летливи органични замърсители, фотокаталитично разграждане и улавяне на CO₂. Извършени са кинетични анализи на фотокаталитични реакции, както и *in vitro* изпитвания на контролирано освобождаване на биоактивни вещества от модифицирани носители. В резултат от тази дейност са предложени ефективни и устойчиви технологични решения с потенциал за приложение в енергетиката, екологията, медицината и преработвателната индустрия.