

Ръководител на стажа: доц. д-р Нина Кънева

Контакти: кабинет 329, nina_k@abv.bg ; nhnk@chem.uni-sofia.bg

Кратка биография: д-р Нина Кънева е доцент в Катедра Неорганична химия към Факултета по Химия и Фармация на Софийски университет „Св. Климент Охридски“. Нейните изследователски интереси са свързани с хетерогенна фотокатализа за разграждане на органични багрила и фармацевтични лекарства; синтез и характеризирание на полупроводникови катализатори (ZnO, TiO₂) - чисти и селективно ко-каталитично фотофиксирани; синтез на хеликсни структури (природни полимери – полизахариди) със специфични високоеластични характеристики, който да служат за матрица на наночастици (ZnO, TiO₂). Тя е съавтор на 82 публикации, от които 44 са с импакт фактор (SCOPUS) и един учебник (Всичко за кандидат-студентите по химия и опазване на околната среда). През 2008 г. добива международен научен опит работейки в Прага (Charles University, Department of Neorganic chemistry, Faculty of Science, Host: Assoc. Prof. David Navlicek). През 2009 г. в Япония, тема на работа: синтез и характеризирание на квантови точки от ZnSe. Saitama University, Department of Chemistry, Saitama, Japan. (Host: Prof. Seiichiro Nakabayashi). През 2010 и 2011 г. е носител на грамота за високи постижения в областта на науката и успешно преставяне на СУ „Св. Климент Охридски“ в международни прояви. През 2011 г. специализация в Университета Bar-Ilan в Израел за 1 седмица. През 2011 г. получава стипендията на фондация „Еврика“ за млад учен на името на Ростислав Каишев - област Химия. През 2017 г. е носител на почетната награда на името на проф. д-р Янко Димитриев (ХТМУ, Катедра „Технология на силикатите“) за научни постижения на докторанти и млади учени в областта на материалознанието, химичните технологии и нанокompозитните материали. През 2022 г. е носител на "Национална стипендиантска програма За жените в науката" на Лореал и Юнеско с проект „Пречистване на води от фармацевтични лекарства“.

Научна продукция: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26435301500>
<https://www.researchgate.net/profile/Nina-Kaneva/research>
<https://orcid.org/0000-0002-2010-7118>

Научни интереси: хетерогенна фотокатализа за пречистване на води от органични багрила и фармацевтични лекарства, синтез и охарактеризиране на полупроводникови катализатори (частици, прахове, филми), фотофиксирание на ко-катализатори върху повърхността на полупроводникови материали, образуване на природни полимери (хеликсни структури) и тяхното композиране върху твърди повърхности (ZnO, TiO₂ наночастици)

Обща информация за кръжочната работа:

<i>Опит:</i>	не е необходим, придобива се по време на кръжочната дейност
<i>Работно време:</i>	съобразено с времето и възможностите на студента
<i>Продължителност:</i>	до приключване на изследователската задача
<i>Език:</i>	английски език (минимално ниво – четене с разбиране)
<i>Възможност за:</i>	<ul style="list-style-type: none">✓ придобиване на знания за синтез и изследване на фотокаталитичната ефективност на използваните катализатори✓ усвояване на умения за работа с апарати свързани с методите за характеризирание на различни структури (структурни, оптични и фотокаталитични свойства)✓ реализация и работа в екип✓ развиване на креативност✓ представяне на получените резултати в

- | |
|---|
| научни конференции (национални и международни) |
| ✓ участие в научни публикации |
| ✓ разработка на дипломна работа за ниво бакалавър (защитата се равнява на държавен изпит) и магистър. |

Наноструктурирани ZnO тънки филми с повишена ефективност във фотокаталитичните процеси

Интереси на студента: цинков оксид, зол-гел метод, методи за приготвяне (dip-coating, spin coating), влияние на допанта (редкоземни, преходни и благородни елементи) и механизъм на действие, фотокаталитично отстраняване на органични замърсители (багрила и фармацевтични лекарства).

Научни статии по темата с участие на ръководителя:

1. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2014.02.004>
2. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2010.11.031>
3. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2011.04.119>

Резюме:

Цинковият оксид е известен като един от важните фотокатализатори, поради своите предимства: ниска цена, голяма начална скорост на фотокатализа, висока повърхностна реакционна способност, ефикасност при абсорбция на светлина и екологична безопасност. Освен изключителния приоритет като добър фотокатализатор и предимства, цинковият оксид има и недостатъци: (i) ZnO абсорбира УВ, но не и видимата светлина от слънчевия спектър; (ii) рекомбинация на двойката заряди (e^-/h^+), което възпрепятства тяхната дифузия и забавя реакциите им; (iii) корозия и фотокорозия във вода под действието на УВ-светлина. За преодоляване на посочените проблеми са направени изследвания свързани с промяна на повърхностно-електронната структура на ZnO.

Полупроводници с широка забранена зона са много активни при облъчване с УВ светлина. След дотиране, електронната структура се модифицира с цел да се разшири абсорбцията на фотокатализатора в областта на видимата светлина. По този начин активността на дотирания фотокатализатор се влошава: макар че абсорбционната зона на фотокатализатора е изместена към червено, полупроводникът може да абсорбира повече фотони и активността да намалее при същите условия на облъчване. Няколко са причините за това поведение: добавените допанти могат да рекомбинират и вложената енергия да се загуби; без да се вземат предвид местата на рекомбинация на допантите, отделните междинни състояния могат да намалят редуцирания или окислителния потенциал на модифицираните полупроводници в сравнение с чистия материал и активността намалява.

Проводимостта на полупроводниците може да се подобри, като се извърши дотиране с подходящи чужди атоми, които нарушават решетъчния строеж на кристала. В резултат на дотирането се появяват свободни електрони или дупки, с което чувствително се повишава активността. В зависимост от валентността на примесите, с които става дотирането, се различават електронна (n-проводимост) и дупчеста (p-проводимост) проводимост. P – проводимост се получава чрез дотиране на примеси с по-малък брой валентни електрони (акцептори) - в кристалната решетка се образуват "свободно движещи" се дупки. N – проводимост се получава чрез въвеждане на допанти с по-голям брой валентни електрони

(донори) - в кристала се получават свободни електрони. Въпреки дотирането, полупроводниците остават електронеутрални.

- **Зол-гел синтез на модифицирани TiO_2 нанопрахове за разграждане на багрила и фармацевтични лекарства от различни видове води**

Интереси на студента: зол-гел синтез, TiO_2 прахове, влияние на добавките върху свойствата на полупроводника, фотокатализа с органични багрила и фармацевтични лекарства.

Научни статии по темата на ръководителя:

1. <https://doi.org/10.3390/catal13020257>
2. <https://doi.org/10.3390/ma16196400>
3. <https://doi.org/10.3390/molecules26133824>

Резюме:

Зол-гел методът дава възможност за получаването на TiO_2 съдържащи аморфни и кристални материали. Благодарение на уникалните си свойства TiO_2 и зол-гел получените материали на негова основа са широко разпространени и използвани като катализатори, защитни покрития, оптични материали, самопочистващи се повърхности и активни съставки на слънцезащитни козметични продукти. Известно е, че тези материали проявяват и добри фотокаталитични свойства, и затова се използват за пречистване на отпадъчни води чрез разграждане на органични замърсители. Модифицирането му с различни метални и неметални йони дава възможност за подобряване на фотокаталитичната активност на TiO_2 чрез намаляване ширината на забранената му зона. Продължава търсенето на оптималната концентрация на добавките с цел постигането на висока фотокаталитична активност на TiO_2 за разграждане на багрила и фармацевтични лекарства в различни видове вода в присъствие на ултравиолетова и слънчева светлина.

- **Селективно фотофиксиране на ко-катализатори върху повърхността на полупроводникови материали**

Интереси на студента: ко-катализатори улавящи електрони и промотиращи редукционни процеси, ко-катализатори улавящи дупки и промотиращи окислителни процеси, механизъм на фотофиксиране, хетерогенна фотокатализа

Научни статии по темата с участие на ръководителя:

1. <https://doi.org/10.3390/catal13071121>
2. <https://doi.org/10.3390/catal13020245>

Резюме:

В литературата са описани редица ко-катализатори, които могат условно да бъдат разделени на два типа, според преференциално натрупващите се върху повърхността им фотогенерирани заряди и съответно окислително-редукционният процес. *Ко-катализатори улавящи електрони* (благородни метали (Pt, Au, Ag) и преходни метали (Cu, Ni)). Хетеропреходът се базира на формиране на бариера на Шотки, на база по-ниското разположение на нивото на Ферми при тези метали, спрямо зоната на проводимост на фотокатализатора, което позволява пренос на фотовъзбудени електрони към метала. Натрупването на отрицателни заряди върху този тип ко-катализатори промотира протичането на редукционни процеси. Този ефект е често експлоатиран при модифициране на фотокатализатори за ефективно фотокаталитично разграждане на замърсители. *Ко-катализатори улавящи дупки* (аморфни и нестехиометрични оксиди на преходни метали (MnOx, FeOx, CoOx и други)). В контакт с фотокатализатора те образуват PN-хетеропреход (TiO₂ и ZnO се държат като полупроводници от N-тип). Преносът на електрони е възможен от зоната на проводимост на кокатализатора, към положително-заредени дупки в зоната на проводимост на фотокатализатора (ефективно, пренасяйки дупката към кокатализатора). Натрупването на некомпенсирани положителни заряди върху ко-катализатора промотира протичане на процеси на окисление на повърхността му. Освен за по-ефективното разделяне на фотогенерирани заряди ко-катализаторите имат и други спомагателни роли в повишаване на фотокаталитичната активност. Чрез повърхността си те предоставят допълнителни реакционни центрове, които могат да са специфични за определени процеси или да координират специфични реакционни субстрати.

Кокаталитично-модифицираните филми се очаква да проявят повишена цялостна фотокаталитична активност, поради ефективно разделяне на фотогенерираните заряди на границата на формираните с фотокатализатора хетеропреходи, което ограничава загубите от тяхната рекомбинация.

- **Образуване на природни полимери (хеликсни структури) и тяхното композиране върху твърди повърхности (наночастици)**

Интереси на студента:

Резюме

Полизахаридите, като карагенани и ксантани, са известни с възможността си да формират хеликсни структури, които създават мрежи с уникални вискоеластични характеристики. Те се различават по броя на сулфатните групи в полимерния си скелет и способността си да се структурират в присъствие на различни соли. Най-важното е, че карагенаните имат способността да формират еластични структури и да контролират вискозитета на разтворите. Целта е дефинирането на оптимални условия за конструиране на стабилни архитектури – иновативни нанокомпозитни хибридни материали, способни да стабилизират фотокаталитични наночастици. Фотокаталитично активните структури TiO₂/ZnO/PAN, например, са потенциални филтриращи материали за системи за пречистване на отпадъчни води от органични замърсители, което отменя необходимостта от следващи етапи за разделяне на катализаторите от течната среда