

## РЕЦЕНЗИЯ

от доц. д-р Галя Костова Маджарова

Член на научното жури по конкурса за доцент по направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) към Катедра Органична химия и фармакогнозия при Факултета по химия и фармация на Софийския Университет “Св. Климент Охридски”, обявен в ДВ бр. 61/28.07.2017г.

Единствен кандидат в конкурса за доцент по Теоретична химия е гл. ас. д-р Петко Стоев Петков. Кандидатът е представил всички изисквани по закона документи и материали.

Петко Стоев Петров е възпитаник на ФХФ при СУ, специалност “Химия”. Завършва бакалавърска степен през 2002 г. и с пълно отличие магистърска програма „Изчислителна химия“ през 2004 г. От 2004 г. до 2009 г. е докторант в Катедрата по Органична химия към ФХФ на СУ с научен ръководител проф. дн Г. Вайсилов. Като докторант специализира в Техническия университет в Мюнхен (5+2 месеца) и Университета Якобс Бремен (1 месец). От 2009 г. е главен асистент в катедрата по Органична химия и фармакогнозия при ФХФ. През 2010 г. д-р Петков печели DFG изследователска стипендия и специализира в Университета Якобс Бремен (1 месец). От 2014 до 2017 г. работи като постдокторант в Университета Якобс, Бремен (2 години) и Университета в Лайпциг (1 година).

Д-р. П. Петков е съавтор на **31 научни публикации**, от които 4 са включени в дисертационния труд за придобиване на ОНС „Доктор”. По тези публикации са забелязани **328** цитата. В конкурса се представя с **24 научни публикации**, 21 от които са в международни списания с импакт фактор, а една е глава от книга. **75 % от публикациите** са в списания с импакт фактор **по-голям от 3.0**. Забелязаните цитати по работите в конкурса са **290**. Хирш индексът на д-р Петков към момента на подаване на документите е **h=9**. Д-р П. Петков е представил своите научни резултати с устни доклади на 3 национални и 6 международни форума.

Обобщената наукометрия еднозначно представя д-р Петко Петков като разпознаваем, активен и продуктивен изследовател.

В материалите по конкурса д-р П. Петков представя и хабилитационен труд „Моделиране на локалната и тримерната структура на порести материали (зеолити и метал-органични решетки (MOF))” в обем от 29 страници, в който са обобщени резултатите от проучванията му по тази тема.

**Научноизследователска дейност:** Научните изследвания на кандидата са фокусирани в областта на квантовохимично моделиране на структурата и свойствата на микропорести материали като зеолити и метал-органични решетки, както и на взаимодействията, които протичат на техните повърхности. Прочуванията адресират важни за практиката каталитични системи и процеси. Публикациите на д-р П. Петков са в пет направления:

(1) Изследване на структурата на метални клъстери в газова фаза и в порите на зеолити [3, 18, 23, 25-29, ];

(2) Взаимодействие на малки молекули с метални йони в зеолити и метал-органични решетки [2,11,14,17, 21];

(3) Моделиране на локалната и тримерната структура на порести материали (зеолити, метал-органични решетки). [5, 9, 13, 15, 19];

(4) Взаимодействие на малки молекули с повърхност на  $\text{CeO}_2$ . [7, 8, 20, 24]

(5) Моделиране на структурата и спектралните характеристики на органични молекули и биомолекули. [4, 6, 10, 12, 22].

Първото направление, Изследване на структурата на метални клъстери в газова фаза и в порите на зеолити, е естествено продължение на изследванията по тематиката на докторантурата. Използвайки теория на функционала на плътността новите проучвания [23] проследяват как примесни атоми (Н, С или О) променят свойствата на малки метални клъстери на преходни метали като Rh, Ir, Pd, Pt и Ni. С помощта на получените резултати за значително увеличаване на средните междуатомни разстояния в клъстера в присъствие на С или О атоми авторите обясняват експериментално наблюдаваните EXAFS изследвания. Моделирането е продължено [25] и в посока на изясняване на каталитичната роля на малките метални клъстери в реакции на хидрогениране. Показано е значението на геометрията и влиянието на носителя върху процеса на адсорбция на  $\text{H}_2$ . Моделирани са тетраедрични метални клъстери на Ir, Rh и Pt отложени върху зеолитна подложка, представена като шест членен пръстен от структурата на фужазит. Показано е, че за разлика

от почти линейното намаление на енергията на адсорбция на  $H_2$  с увеличаване на броя адсорбирани  $H$  атоми върху клъстера в газова фаза, при металните клъстери отложени върху зеолитен фрагмент се наблюдава максимум в енергията на адсорбция за дадено критично натоварване на клъстера с водород, което варира от  $\sim 9H$  за  $Rh_4$ ,  $\sim 12H$  за  $Ir_4$  и  $\sim 13H$  за  $Pt_4$ . Изследването е разширено и обобщено в обзорна работа [18], като е проследено състоянието на метални клъстери на преходните метали от групата на  $Fe$ ,  $Co$ ,  $Ni$  и  $Cu$ , в кухините на моделни зеолити съдържащи  $Al$  атоми в решетката. Важен извод от проучването е, че при наличие на мостови  $OH$ -групи в близост до клъстера става спонтанен трансфер на  $H$  от тези мостови групи върху металния клъстер. Изследванията на д-р П. Петков върху функционализирани пори на метал-органична решетка  $UiO-66$  с  $NH_2$  групи [3] демонстрират, че модифицирането оказва силно влияние върху формирането на  $Pd$  клъстери в порите на решетката, което може да се използва за контролиране на размера и стабилността на образуваните метални клъстери.

Второто направление на научните изследвания на д-р П. Петков е насочено към описание на свойствата на модифицирани зеолити с катиони на преходни метали и възможното им приложение като адсорбенти за пречистване на водород от примеси на  $CO$  и други газове в горивни клетки [21]. Използвайки градиентно корелиран функционал  $PW91$  и периодични модели авторите показват, въз основа на оценка на термодинамични характеристики и пресмятане на инфрачервени честоти, минималните количества от примесите, които могат да бъдат достигнати за всеки сорбент. Охарактеризирането на структурата на високосиметрични порести материали като метал-органичните решетки и по-специално  $NKUST-1$  е фокус на работи [14, 11 и 2]. Авторите изследват в детайли необичайна допълнителна  $CO$  ивица в ИЧ спектъра на  $NKUST-1$  и с помощта на теоретично моделиране доказват, че тя се дължи на дефекти в решетката от  $Cu^+$  йони. Експерименталното и теоретично изследване в работи [2,11] насочва към появата на парамагнитни центрове в структурата на  $NKUST-1$ , когато тя е дотирана с  $Zn^{2+}$ . Модифицираната структура е изучавана с цел повишаване на селективността в разделяне на  $CO_2$  от  $N_2$  и  $CH_4$ . Експериментално определените ЕПР параметри и теоретичното моделиране дават информация за локалната структура в такъв тип порести материали при адсорбция на  $CO$ ,  $CO_2$  и др. молекули.

Третото направление, Моделиране на локалната и тримерната структура на порести материали (зеолити, метал-органични решетки), включва проверка и валидиране на метода на силната връзка като приближение към теорията на функционала на плътността (DFTB) и сравнение на резултатите с експериментални и теоретични данни от клъстерни модели [19]. Особен интерес от теоретична гледна точка представлява работа [5]. С помощта на *ab initio* молекулно-динамични (BOMD) симулации авторите моделират и наблюдават експериментално нискотемпературна феромагнитна фаза с температура на Кюри от порядъка на 22 K в квазилинейна серия SURMOF-2 от метал-органични решетки. Моделната система отваря възможност за търсене на нови материали за спинтрониката. Работа [9] изучава Mg-NID MOF и показва неговите отлични солватохромни свойства както и възможността този материал да се използва като сензор за органични амини. Резултатите от проучванията в това направление са обобщени в хабилитационния труд на д-р П. Петков.

Четвъртото направление е посветено на теоретично описание на взаимодействията на малки молекули върху  $\text{CeO}_2$ . В публикация [24] са моделирани различни молекулни форми получени при взаимодействие на CO и  $\text{CO}_2$  с активирана повърхност на  $\text{CeO}_2$ . Изследването е разширено, като е моделирана и адсорбция на вода и  $\text{H}_2$  [20]. Комбинирано теоретично и експериментално изследване [7, 8] на важно за практиката каталитично преобразуване на NO до  $\text{N}_2$  върху редуцирана цериева повърхност показва, че в процеса се достига до образуване на азиди ( $\text{N}_3$ ) и дианиони на азотен оксид ( $\text{NO}^{2-}$ ) при едновременно окисляване на  $\text{Ce}^{3+}$ . Тези резултати предлагат нов механизъм на каталитично преобразуване на NO.

Петото направление в научните изследвания е моделиране на структурата и спектралните характеристики на органични молекули и биомолекули. В търсенето на нови катализатори, които не съдържат преходни метали, са изследвани вътрешномолекулни фрустрирани Люисови двойки (FLPs) с обща формула  $\text{Mes}_2\text{PCHRCH}_2\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_2$  и е предложен алтернативен междумолекулен механизъм за активиране на  $\text{H}_2$  [6]. Този механизъм включва формиране на димер от два домена с отворена верига, които могат да активират до две молекули водород. Показана е ключовата роля на стеричните фактори (обемни заместители) за активността на този тип катализатори. В други две изследвания специално внимание е посветено на формирането на водородни връзки между метанол и протоноакцепторни групи от други органични молекули [22] и във фосфор-заместени 7-

амино кумаринови молекули [10] в различни разтворители. За модифицираните кумарини е изчислено, че се осъществява частичен пренос на електронна плътност през фосфоновата група към първата солватна обвивка на кумарина. Поведението на свободни електрони в полярните течности [4] и процесите на солватацията на  $\text{Na}^+$  и  $\text{Mg}^{2+}$  противойони около РНК-фрагмент [12] са изследвани с BOMD метод. Описано е много динамичното поведение на  $\text{Na}^+$  йони, от свързано до напълно солватирани състояние, с променящо се координационно число, докато  $\text{Mg}^{2+}$  йони имат две предпочитани състояния – директно свързани или напълно солватирани с 6 атома в първата координационна сфера.

Представените за рецензия научни трудове отговарят на тематиката на конкурса и са в областта на теоретичната изчислителна химия. Научните публикации на гл. ас. д-р Петко Петков се отличават с работа в сътрудничество с експериментални групи. Проведените изследвания обогатяват научното познание, като изясняват поведението на изследваните системи или предсказват необичайни свойства. Прави впечатление, че кандидатът използва голям арсенал от теоретични методи, който включва квантовохимично пресмятане на статични клъстерни модели и периодични структури, както и използването на *ab initio* молекулно-динамични симулации.

**Преподавателска дейност:** Гл. ас. Петков преподава и в трите нива на обучение на студентите.

В *бакалавърското ниво* той води лекции по **Органична Химия** (сп. Биология и сп. ЕООС, 3.О., 45 ч., задължителен), **Училищен курс по химия** (сп. Биология и география, Р.О., 24 ч., задължителен) **Молекулно моделиране на функционални материали** (сп. ИХСМ, Р.О., 30 ч. + 30 ч. упр., задължителен), както и семинари и упражнения по **Органична химия I и II** за всички специалности на ФХФ и БФ (Р.О. и 3.О.) и упражненията по **Приложна квантова химия**, бак. ИХСМ.

В *магистърско ниво* д-р Петков е титуляр на 3 курса **Компютърно моделиране на органични съединения** (маг. програма Съвременни методи за синтез и анализ на органични съединения, Р.О., 30 ч., задължителен), **Хибридни QM/MM методи** (маг. програма Изчислителна химия, Р.О., 30 ч. задължителен) и **Увод в програмирането на Линукс обвивка** (маг. програма Изчислителна химия, РО, 30 ч. + 30 ч. упр., свободно-избираем).

В ниво докторанти д-р Петров е бил научен консултант на 1 докторант.

Учебната натовареност на д-р Петков показва сериозна ангажираност в образователния процес в катедрата и факултета. Той е титуляр на лекциите на 6 курса в магистърско и бакалавърско ниво на преподаване. Разработените от кандидата лекционни курсове, включително съвместна работа със студенти и докторанти в научноизследователски проекти, представят д-р П. Петков като високо квалифициран университетски преподавател.

Д-р Петков има солиден опит в организиране на национални и международни конференции и симпозиуми като: FEZA 2017 - Конференция на федерацията на европейските зеолитни асоциации; 2005, 2007, 2009, 2011 г. - Международен симпозиум по съвременни микро- и мезопорести материали; 2002, 2004, 2006, 2009 г. - Международна Хумболдтова конференция по Изчислителна Химия; 2002 – 2017 г. Национална конференция по Химия за студенти и докторанти.

Д-р Петко Петков е уважаван колега, опитен и непрекъснато развиващ се професионалист в областта на теоретичната химия. Личните ми впечатления от него са отлични. Той умее да работи със студентите и да предизвиква у тях желание за усвояване на знания и за самостоятелно решаване на поставените им задачи. Професионалната му компютърна грамотност му позволява не само да администрира изчислителния клъстер на Лабораторията по органичен катализ, но и да консултира други колеги от ФХФ.

### **Заключение**

Кандидатът в конкурса за доцент, гл. ас. д-р Петко Петков е утвърден изследовател в областта на теоретичната химия със стойностна научна продукция и натрупан значителен преподавателски опит. Той е подготвен да формулира и ръководи самостоятелно изпълнението на научни проекти.

Представените материали **съответстват** напълно на всички изисквания от Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски” и **надвишават** всички допълнителни критерии за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ за

професионално направление „Химически науки”. Въз основа на гореизложеното считам, че д-р Петко Стоев Петков напълно удовлетворява условията за заемане на академичната длъжност „доцент“.

Убедено препоръчвам на Почитаемия Факултетен съвет на Факултета по химия и фармация в Софийски Университет „Св. Климент Охридски“ да присъди на гл. ас. д-р Петко Стоев Петков академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия).

20.11.2017г

Рецензент:

(доц. д-р Галя Маджарова)