

СТАНОВИЩЕ

по конкурс, обявен в ДВ бр. 61 от 28.07. 2017, за придобиване на академичната длъжност „доцент” по направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) с единствен кандидат гл. ас. д-р Петко Стоев Петков

Рецензент: проф. дхн Тания Стоянова Христова, Институт по органична химия с Център по фитохимия, БАН

Д-р Петко Петков завършва висшето си образование като магистър през 2004 г. в Химическия факултет на Софийски университет „Св. Кл. Охридски”. От 2004 до 2009 г. е редовен докторант във факултета, специалност „Теоретична химия”. В началото на 2009 г. защитава докторска дисертация на тема „Влияние на неметални атоми върху свойствата и реакционната способност на малки никелови кълъстери- изследване с теорията на функционала на плътността”. През същата година е избран за главен асистент в катедра „Органична химия” (сега катедра по Органична химия и фармакогнозия), където работи и досега. Многократно е бил на краткосрочни специализации в Техническият университет, Мюнхен и Университета Якобс, Бремен, като в последния през 2014-2016 г. е бил и на пост-докторантско обучение. През 2016 г. работи като научен работник в университета в Лайпциг. Понастоящем д-р Петков упражнява активна преподавателска дейност в Химическия факултет на СУ „Кл. Охридски” като изнася лекции и провежда семинари и упражнения на студенти в областта на: „Органична химия”, „Молекулно моделиране на функционални материали”, „Компютърно моделиране на органични съединения”, „Увод в програмирането на Линукс обвивка”, „Приложна квантова химия” и др. Бил е ръководител на 1 дипломант. Участвал е в организационните комитети на редица национални и международни научни форуми. Активно участва в изпълнението на научни проекти.

Гл. ас. Петко Петков е съавтор на 29 публикации в реномирани международни списания, повечето от тях с много висок импакт фактор, и на 1 статия в сборник от международна конференция. Съавтор е на книга „Modelling of Nanoporous Materials”, Elsevier, Amsterdam, 2009 г. 25 от публикациите са публикувани след защита на докторската дисертация, като в близо 1/3 от тези трудове кандидатът заема водеща позиция. Общият импакт фактор от публикациите на кандидата след защита на

докторската дисертация е над 125. Резултатите от изследванията са представени чрез устни доклади на кандидата на 9 научни форуми (6 от тях след защитата на докторската дисертация) у нас и в чужбина, включително в Германия, Япония, Китай и др. Трудовете на д-р Петков са цитирани над 330 пъти (290 цитати са върху статиите, участващи в конкурса). Заслужава да се отбележат публикациите, излезли през последните години, „Solid state organic amine detection in a photochromic porous metal organic framework” (2015 г.) и “Re-assignment of the vibration spectra of carbonates, formates and related surface species on ceria: A combined Density Functional and Infrared investigation” (2011 г.), които до сега са намерили над 80 пъти отражение в световната научна литература.

Кандидатът участва в конкурса с 23 публикации и 1 глава от книга. Изследователската дейност на д-р Петков е насочена основно в следните направления: теоретично моделиране структурата и свойствата на микропорести материали, спектроскопско изследване на аб/адсорбция на атоми и молекули в порите на микро-порести материали и върху метални клъстери и моделиране на структурата и спектралните характеристики на органични молекули и биомолекули. Изследванията върху структурата на метални клъстери в газова фаза и в порите на зеолити представляват продължение и обобщение в обзорна работа на изследванията, започнали по време на изработване на докторската дисертация на кандидата. Съществен извод от проведените изследвания на адсорбирани Н, С и О атоми върху метални клъстери на различни преходни метали с малък брой атоми е необходимостта от индивидуален подход, поради силната зависимост на свойствата на клъстера от броя на атомите в него. Показан е ефект на зеолитния носител върху изменението на дължината на М-М връзките в малки клъстери на Pt, Ir, Rh, Fe, Co, Ni, Cu, както и на енергията на адсорбция при дисоциативната адсорбция на водород. Показана е възможността за модифициране на металните центрове в резултат на трансфер на Н от мостови хидроксилни групи в зеолита, намиращи се в близост до центъра. Демонстрирано е, че функционализирането на MOFs с аминокиселини може съществено да повлияе размера и стабилността на металните клъстери в тях. Проведени са оригинални квантово-химични изследвания за определяне на ефективността на метал-йоннообменени зеолити при фина очистка на водород от различни примеси с приложение за хранене на горивни клетки. Чрез съчетание на теоретичното моделиране с ИЧ изследвания на молекули сонди (CO) е доказана силна координационна ненанаситеност на Ni⁺ йоните в решетката на зеолит тип морденит. Направен е извод, че доброто съответствие между геометричните и ЕПР

параметри и теоретично определените чрез теорията на функционала на плътността за Zn заместен HKUST-1 е предпоставка за използване на ЕПР спектроскопията при изследване на локалната структура в такъв тип порести материали при адсорбция на различни молекули. Показано е, че индивидуалните изолирани градивни единици в MOFs запазват своите електронни свойства, когато се интегрират в периодична решетка. Несъмнен принос в работата на кандидата е систематизирането и оценката на различните теоретични подходи за моделиране на структурата и взаимодействието на адсорбати с метални йони в зеолити и MOFs. Чрез комбиниране на теоретичните и ИЧ експериментални данни е направено ново и изчерпателно отнасяне на характеристичните ивици в ИЧ спектрите за различни частици, които се формират при взаимодействие на CO и CO₂ с редуцирана и хидроксилуирана повърхност на CeO₂. Моделирана е адсорбцията на азотни оксиди върху CeO₂ повърхност, което е използвано за изработване на нова хипотеза за механизма на превръщане на NO. Чрез теоретични изследвания е показан нов механизъм на взаимодействие на водород с вътрешно молекулни Люисови двойки (FLPs). Значими резултати са получени в резултат на теоретичните изследвания на взаимодействие на органични и биоорганични молекули с различни разтворители. Установената обща корелация между енталпията на свързване на комплекси и електростатичния потенциал на водородния атом, участващ в образуване на водородна връзка, е в основата на важни изводи, свързани с възможността за блокиране на биосинтеза на протеина в живата клетка при доставяне на определени функционални групи (например чрез лекарствени средства). На базата на ab-initio симулации е проследена еволюцията на солватирани електрон във вода и алкохоли след фотойонизация, както и солватацията на Na и Mg противойони около РНК-фрагмент.

Представеният хабилитационен труд обобщава изследванията на кандидата в областта на „Моделиране на локалната и тримерна структура на порести материали- зеолити и метал -органични решетки (MOFs)“. Кандидатът разглежда проблеми, свързани с валидиране на DFTB метода за моделиране на структурата на MOFs, локалната структура в Cu²⁺ -съдържащи MOFs и възможността за прилагане на молекули сонди, като CO, за определяне на дефектите в тях, както и характеризиране на относителната стабилност на силикатни, германо-, титано- и цинк-силикатни форми за зеолити. В резултат на изследванията са направени важни изводи за приложимостта на квантовия метод за изучаване на структурите характеристики, електронните свойства и симулиране разпространението на адсорбати в различни класове MOFs, съставени от

над 10 000 атома. Чрез съчетание на ИЧ спектроскопски резултати и симулиране на кристалографските параметри са направени изводи за характера на свързване на медните йони в SURMOF-2. Въз основа на установената стабилност на Si форма на ITQ-44 зеолита е направено предположение за ролята на Ge по време на синтеза, дискутирана е стабилността на Si и Ge атоми в различни позиции на зеолитната решетка при пост-синтезното му третиране, доказана е благоприятната роля на Al за пълното заместване на Ge в решетката на зеолита.

По представените материали нямам критични бележки.

Заклучение

Научните изследвания на гл.ас. д-р Петко Петков изцяло отговарят на тематиката на обявения конкурс за присъждане на академичната длъжност „доцент”. Д-р Петко Петков е много добър специалист в областта на теоретичното моделиране на структурата и свойствата на микропорести материали, спектроскопско изследване на аб/адсорбция на атоми и молекули в порите на микро-порести материали и върху метални кълстери и моделиране на структурата и спектралните характеристики на органични молекули и биомолекули. Публикационната дейност след защита на докторската дисертация, цитатите върху публикуваните резултати, активната преподавателска дейност, участието в проекти и организирането на научни форуми напълно покриват всички изисквания в Закона за развитие на академичния състав и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ “Св. Кл. Охридски”.

Поради това, убедено препоръчам на членовете на уважаемото Научно жури и на почитаемия Факултетен съвет на Факултета по химия и фармация при СУ „Климент Охридски” да присъдят на гл.ас. д-р Петко Петков академичната длъжност “доцент” по научната специалност „Теоретична химия”.

30.10.2017 г.

София

Рецензент:



/ проф. дхн Таня Христова/