

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс, обявен в брой 42 на ДВ от 10.05.2013 г., за придобиване на академичната длъжност „доцент” по професионално направление 4.2. ”Химически науки”, научна специалност „Химична кинетика и катализ”, с единствен кандидат д-р Димитър Александров Панайотов

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

1. Общи данни за кандидата.

Д-р Димитър Панайотов е роден в г. Варна през 1950 г. Висшето си образование завършва в Университет „Проф. д-р Асен Златаров” през 1975 г., специалност „Технология на неорганичните вещества”. В периода 1977-1980 г. е редовен докторант в Института по обща и неорганична химия (ИОНХ), БАН. След успешна защита на докторска дисертация на тема” Каталитична активност на катализатори с шпинелна структура за каталитична редукция на азотен оксид”, д-р Панайотов работи като асистент и главен асистент в ИОНХ, БАН. През 1982 г. е изпратен на 6 месечна специализация в Института по физикохимия на РАН, Москва, а през 1986 г. - на едногодишна специализация в Surface Science Center, на Университета в Питсбърг, САЩ. През 1996 г. е избран за доцент в ИОНХ, БАН и заема тази длъжност до 2008 г., след което е освободен поради продължително отсъствие във връзка с работа в чужбина. В периода 2002-2006 г. д-р Панайотов е последователно гост- изследовател и изследовател в Surface Science Center на Университета в Питсбърг, САЩ. В периода 2006-2008 г. е на след дипломна квалификация в Department of Chemistry Virginia Tech,

Блексбърг, САЩ, където в следствие до 2011 г. работи като изследовател. След завръщането си в България, д-р Панайотов е привлечен за кратко (март-юни, 2012 г) на работа във Факултета по химия и фармация на Софийски Университет по проект EP7 “Beyond Everest”, а от април 2013 г. е назначен като химик в ИОНХ, БАН. От изложените данни се вижда, че кандидатът д-р Панайотов формално удовлетворява условията на Закона за развитие на академичния състав в Република България за заемане на академичната длъжност „доцент” (вж. чл.27, ал. 2.1 и ал. 2.2.б).

2. Научна продукция.

Д-р Димитър Панайотов е съавтор на 51 публикации. По темата на конкурса участва с 26 публикации, като последните са изцяло публикувани в списания, включени в база данни на ISI. Осемнадесет от тези публикации са излезли от печат след провеждането на първия конкурс за избиране на кандидата на академичната длъжност „доцент” в ИОНХ, БАН. Осем от представените по конкурса трудове са в съавторство с български автори, 3 са в екип с изследователи от Department of Chemistry Virginia Tech, а останалите- съвместно с учени от University of Pittsburgh. В почти всички представени трудове кандидатът е на първа или втора позиция в авторския колектив, което безспорно доказва активното му участие в тяхното изработване. Данни за разпределението на рецензираните трудове по списания, импакт фактор, годините на публикуване и забелязаните цитати са представени в Таблица 1.

Таблица 1.

No	Списание	Импакт фактор	Година на публикуване	Цитати
1	Appl. Catal.	1.07*	1986	12
2	Appl. Catal.	1.07*	1987	4
3	J. Phys. Chem.	1.95*	1987	106
4	JACS	10.68	1988	189
5	J. Phys. Chem.	1.95*	1988	3
6	Stud. Surf. Sci. Catal.	1.26	1993	3

7	Appl.Catal. B:Env.	6.03	1995	2
8	React. Kinet. Catal. Lett.	0.93	1996	9
9	Appl.Catal. B:Env.	6.03	1998	26
10	Surf. Interface Anal.	1.26	2002	1
11	Mater. Sci. Eng. C	2.59	2003	7
12	Chem. Phys. Lett.	2.15	2003	15
13	J. Phys. Chem. B	3.61	2003	16
14	J. Phys. Chem. B	3.61	2003	29
15	J. Phys. Chem. B	3.61	2004	3
16	Langmuir	4.18	2004	35
17	J. Phys. Chem. B	3.61	2004	11
18	J. Phys. Chem. B	3.61	2004	18
19	Chem. Phys. Lett.	2.15	2004	5
20	J. Phys. Chem. B	3.61	2004	169
21	Chem. Phys. Lett.	2.15	2005	26
22	J. Phys. Chem. B	3.61	2005	92
23	Chem. Phys. Lett.	2.15	2007	27
24	Langmuir	4.18	2009	13
25	J. Phys. Chem. C	4.81	2009	12
26	J. Phys. Chem. C	4.81	2012	5

(*Импакт факторът е за 1992-1993 г.)

Средният брой на публикуваните статии за година е около 2. Особено активна публикационна дейност се забелязва в периода 2003-2004 г., в който са отпечатани 10 от рецензираните статии. Доказателство за значимостта на публикационните трудове на кандидата е високият сумарен импакт фактор на представените публикации (IF=86.67), както и високата цитируемост на статиите от други автори. Общият брой на забелязаните цитати е 1044, като 838 от тях са по рецензираните статии. Бих искала да обърна внимание върху публикациите в J. Phys. Chem. 91(1987) 3133, JACS 110 (1988) 2074, J. Phys. Chem. B 109 (2004) 300 и J. Phys. Chem. B 109 (2005) 15454, за които са забелязани съответно 106, 189, 169 и 92 цитата. H- индексът на кандидата въз основа на всички представени публикации е 16, а отчитайки само публикациите по конкурса-13. Д-р Панайотов е съавтор на 4 патента за получаване на катализатори за почистване на отпадни и отработени газове, като в авторския колектив на два от тях той има водещото участие.

Част от изследванията са представени с 16 доклада на научни конференции, симпозиуми и работни срещи у нас и в чужбина.

3. Анализ на научните приноси.

Основната научноизследователска дейност на д-р Димитър Панайотов е свързана с изследване на природата на каталитично активните центрове и механизма на каталитичните реакции чрез използване на съвременни физични и физикохимични техники, между които: ИЧ спектроскопия, температурно-програмирана десорбция, температурно програмирана реакция. Изследвани са термично и фотохимично активирани каталитични процеси с потенциално приложение за елиминиране на токсични емисии от отпадни или отработени газове (CO, NO или техни смеси в присъствие или отсъствие на кислород). Съществена част от изследванията са насочени към изследване на каталитичната деструкция на S- и P-съдържащи бойни отровни вещества чрез използване на подходящи реагенти- симуланти. Обект на изследване е каталитичното поведение на метални и смесено оксидни катализатори на основата на преходни метали както в самостоятелно, така и в нанесено върху различни носители (SiO₂, Al₂O₃, ZrO₂, псевдо-бьомит-бентонит) състояние. Специално внимание заслужава да се отдели на изследванията посредством ИЧ спектроскопия върху поведението на TiO₂ (монокристален, нанодисперсен прах или в смес със силициев оксид) в условия на редукция, термична или фотохимична активация и промените, които настъпват при взаимодействието му с молекули с различна функционалност.

Бих искала да обърна внимание върху следните основни приноси от научноизследователската дейност на кандидата:

1. Изследване на поведението на смесено оксидни катализатори на преходни метали в реакции на елиминиране на токсични емисии от NO и/или CO.

- Установено е, че най-висока активност по отношение на редукцията на NO с CO притежават Cu-Co- и Cu-Mn- смесено оксидни системи, в които съставът е близък до стехиометричния на шпинелната структура. Доказано е взаимодействие на NO и CO с повърхността на CuCo_2O_4 при стайна температура с образуване на нитро-нитрито и карбонато подобни структури, като този процес се благоприятства от едновременното присъствие на двата газа. Чрез оригинално прилагане на метода на преходния отклик е показано, че при температури над 340 K настъпва вторичен процес на редукция на оксидната повърхност от реагентите, отговаряща на отстраняване на 5 моно слоя решетъчен кислород при 510 K. Направен е извод, че този процес е от съществено значение за запазване на активността на катализаторите в реални условия, предполагащи присъствие на кислород в реакционната смес.

- Патентован е метод за получаване на високо активен катализатор за редукция на NO с CO на основата на Cu-Co шпинел, нанесен върху алумо-силиктен носител (90% бьомит (псевдо бьомит) +10% активиран бентонит, третиран при 1420 K).

-Патентован е метод за получаване на високо активен катализатор за редукция на NO с CO и за окисление на CO с кислород на основата на Cu-Co шпинел, нанесен върху тънки филми от $\text{La}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$, нанесени електрохимично върху неръждаема стомана.

2. Изследване на състоянието на нанесени родиеви наночастици в присъствие на CO и водород.

-Чрез прилагане на IR спектроскопия е показано, че изолирани хидроксилни групи от повърхността на SiO_2 или Al_2O_3 носител участват в трансформирането на родиеви наночастици в $\text{Rh}^1(\text{CO})_2$ повърхностни дикарбонилни комплекси. В отсъствие на CO под влияние на водорода от газовата фаза е показано обратно трансформиране на дикарбонилните комплекси до родиеви наночастици и възстановяване на

повърхностните хидроксилни групи. Резултатите от изследването са намерили широк отклик в световната литература (вж. Табл.1, публ.3 и 4).

-Чрез използването на изотопна газова смес $^{12}\text{C}^{18}\text{O} + ^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ е показано, че адсорбцията на CO върху Rh частици, нанесени върху Al_2O_3 е недисоциативен процес.

3. Термично активирани каталитични процеси върху TiO_2

-Посредством изучаване адсорбцията на кислород е доказано, че термично генерираните кислородни ваканции в TiO_2 имат поведение на плитки донорни нива, което благоприятства преминаването на електрони от тези нива в зоната на проводимост при облъчване с ИЧ светлина. Показано е, че монослойно покритие с вода може напълно да блокира трансфера на електрони.

-Механизмът на термично разлагане на 2-хлоретил-етил сулфид (2-CEES), симулант на иприт, е изучен чрез ИЧ спектроскопско изследване, включително и в условия на ултра висок вакуум върху $\text{TiO}_2(110)$ монокристал. Установено е, че адсорбцията на 2-CEES върху SiO_2 и $\text{TiO}_2 - \text{SiO}_2$ протича чрез генериране на водородна връзка между изолирани повърхностни OH- групи и Cl- и S- групи на реактанта. Повишаването на температурата генерира разкъсването на C-S връзката и следващото участие на решетъчен кислород от TiO_2 в разграждането на образуваните повърхностни фрагменти.

-Показано е, че диметил-метил фосфоната (DMMP), симулант на зарин, се адсорбира върху TiO_2 едновременно в молекулна и дисоциативна форма с участието съответно на повърхностни изолирани хидроксилни групи и Люисови киселинни центрове (координационно ненаситени Ti^{4+} йони). Реактивната хемосорбция води до необратимо блокиране на Люисовите центрове с продукти от окислението на DMMP. Показано е, че екстракцията на решетъчен кислород в следващия стадий на окисление води до

генериране на донорни нива в забранената зона на TiO_2 , въз основа на което чрез ИЧ спектроскопия е определена активиращата енергия на този процес.

4. Фотохимично активирани каталитични процеси върху TiO_2

-Чрез комбиниране на ИЧ и ЕПР спектроскопия е изследвано фотохимичното генериране на заряди в TiO_2 . Установено е, че облъчването с УВ светлина с малка мощност генерира електрони, част от които е локализиран в дълбоки донорни нива в забранената зона и се регистрират като Ti^{3+} парамагнитни центрове, а останалата част остават в зоната на проводимост и се регистрират като непрекъснато ИЧ поглъщане, нарастващо към малките вълнови числа. Фотогенерираните дупки са локализиран в дълбоки акцепторни нива в забранената зона и се наблюдават като O^- парамагнитни частици, образувани от решетъчните O^{2-} йони. Изследването има фундаментално значение за фотохимичното приложение на TiO_2 и е намерило широк отклик в съвременната литература (вж. Табл.1, публ.20).

-Изучено е фотоиндуцираното омекряне на повърхността на TiO_2 . Доказано е, че това явление е свързано с отстраняване на хидрофобния органичен слой от органични замърсители, а не с генериране на хидроксилни групи в резултат на разлагане на адсорбираната вода.

-Чрез сравнително изследване на монокристален и прахообразен TiO_2 е доказано, че в отсъствие на кислород в газовата фаза фотохимичното разграждане на 2-CEES се осъществява с участието на решетъчен кислород. Предложен е механизъм с участието на радикали, инициирани от пренос на заряди от TiO_2 към молекулите на адсорбата, който изключва директното генериране на заряди в 2-CEES.

4. Данни за експертната, преподавателска и други дейности на кандидата.

Д-р Д. Панайотов активно участва в редица проекти с научно приложен характер, между които договор с „ТЕРЕМ“, Търговище за „Разработване на каталитични конвертори на основата на порести неорганични каталитични филми за намаляване на вредните емисии в отработени и отпадни газове“; проект EOENVA-CT97-0633 „Порести неорганични филми и мембрани за приложение за отстраняване на замърсители“ и др. бил е ръководител на 3-годишен проект, спонсориран от НФНИ „Високотемпературни устойчиви металоксидни катализатори, промотирани с благородни метали за отстраняване на CO, въглеродороди и NOx от автомобилни газове“.

Кандидатът е бил ръководител на 2 и консултант на 3 успешно защитили докторанта. Рецензирал е 2 тези на докторанти и многократно е рецензирал публикации в списания. Като член на колектива към Министерството на околната среда и водите на РБ, активно участва в експертни оценки, свързани с проблеми по опазване на околната среда.

По представените материали нямам критични бележки.

Заклучение.

Научните изследвания на д-р Димитър Панайотов изцяло отговарят на тематиката на обявения конкурс за присъждане на академичната длъжност „доцент“. Д-р Димитър Панайотов се оформя като водещ учен в областта на характеризирането на катализатори чрез използване на IR спектроскопия. Неговите разработки имат не само значим фундаментален характер, но са и пряко насочени към решаването на редица екологични проблеми, което е намерило отражение и в създаването на няколко патента. Като имам пред вид и значителния брой на публикуваните материали в реномирани списания, изнесените доклади на международни научни форуми и забележителния брой

на цитатите по публикуваните материали, които напълно отговарят на изискванията на Правилника на ИОНХ, БАН за присъждане на академични длъжности, убедено препоръчам на членовете на уважаемото Научно жури и на почитаемия Научния съвет на ИОНХ, БАН да присъдят на д-р Димитър Панайотов, понастоящем химик в ИОНХ, БАН, академичната длъжност “доцент” по научната специалност **„Химична кинетика и катализ”**.

4.08.2013 г.

Рецензент:

София

/ проф. дхн Таня Христова/