

## РЕЦЕНЗИЯ

от проф. д-р Силвия Живова Тодорова, Институт по катализ-БАН

относно материалите, представени от гл. ас. д-р **Ивайло Георгиев Танков** за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ в Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас, професионално направление 4.2 „Химически науки“, научна специалност „Химична кинетика и катализ“, обявен в в „Държавен вестник“ бр. 95 от 16.11.2021г.

### 1. Общо представяне на материалите на кандидата.

Гл. ас. д-р Ивайло Георгиев Танков е единствен кандидат по конкурса за заемане на академичната длъжност „доцент“. Представеният от кандидата комплект материали е в съответствие с член 67 ал. 2 от Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в Университет „Проф. д-р Асен Златаров“, Бургас.

За участие в конкурса д-р Танков е представил необходимите документи: копие на обявата в „Държавен вестник“; творческа автобиография; копие от дипломата за ОНС „доктор“; документ за доказване на трудов стаж; документи, удостоверяващи учебно-преподавателската дейност с включен списък на дипломанти, ръководени от кандидата, копие на разработени учебни програми и университетски учебник на електронен носител; справка за изпълнение на минималните изисквания; списък на научните публикации; документ за защитен модел; списък с цитати; документи удостоверяващи участието на кандидата в проекти; списък за участия в научни форуми; справка по показател 4 -Хабилитационен труд от „група В“; списъци на научни трудове, цитирания, копия от научните трудове, списък на участия в национални и международни конференции и конгреси.

### 2. Биографични данни на кандидата.

Д-р Ивайло Танков е роден на 07.05.1983 г. в Бургас. Висшето си образование завършва през 2007 г. в Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ – Бургас с магистърска степен по Химия и технология на нефта и газа. В периода юни 2007 – април 2009 г. работи като оператор - химически процеси към фирма за производство на соли с фармакопейна чистота. От октомври 2009 г. е зачислен за докторант в лаборатория „Каталитични процеси в енергетиката и за опазване на околната среда“ към Института по катализ при БАН. Научни ръководители на докторанта са проф. дн Соня Дамянова и доц. д-р Катя Ариширова. През 2013 г. защитава дисертация на тема „Получаване и охарактеризиране на катализатори за реформинг на метан с въглероден диоксид“. След успешна защита на докторската дисертация Ивайло Танков е назначен за асистент в Университет „Проф.д-р Асен Златаров“ – Бургас, а по-късно е избран и за гл. асистент в същият университет, където е и до момента.

### 3. Научна продукция

Д-р Танков е съавтор общо на 33 публикации (31 в списания с импакт фактор), като с 15 публикации участва в конкурса. Всички те са в най-реномираните списания в областта на материалознанието и катализа, като *Journal of Molecular Liquids*, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*; *Journal of Molecular Structure, Fuel*.



Публикациите, участващи в конкурса, са разделени в две групи, покриващи показатели В и Г, съгласно Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности. В първата група, показател В - „Хабилитационен труд - научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (WoS или Scopus)“, са представени 5 публикации (четири от тях попадат в Q1 и една в Q2), като общият брой точки е 120 т., при необходим минимум от 100 т. При всички представени публикации по този критерий, д-р Танков е първи автор.

Във втората група са представени 10 публикации (5-Q1 и 5-Q2), покриващи показател Г, с общо 245 точки при необходимими 200 точки. В групата показатели Д, изискванията също са надвишени значително - необходими 100 т., кандидатът има 144 т. Всички цитирания са в престижни международни списания, което е в подкрепа на значимостта и актуалността на научните разработки на д-р Танков.

Д-р Танков е участник в работните колективи на 1 международен и 3 национални проекта. Международният проект е финансиран от програма Интеррег за транс гранично сътрудничество България -Турция. Това показва, че д-р Танков се отнася много отговорно към поставените задачи, което го прави желан участник в работните колективи.

Популяризирането на научните резултати е осъществено посредством участия с устни и постерни доклади в редица национални и международни научни форуми и е както следва: доклади на международен форум- 1 бр., доклади на национални форуми- 1 бр., постери на международни форуми-1 бр., постери на национални форуми-2 бр.

#### **4. Учебно-преподавателска дейност**

Учебно-преподавателска дейност на кандидата се изразява във водене на лекционни курсове и упражнения по няколко специалности, ръководство на дипломанти и участие в разработване и обновяване на 13 учебни програми. Преподаваните дисциплини от Ивайло Танков са: Технология на органичния синтез, Реакционна кинетика и катализа (234 ч. лекции, 539 ч. упражнения), Органични химични технологии (42 ч. лекции 42 ч. упражнения), Количествено изследване на химичните реакции в нефтохимичния синтез (136 ч. лекции, 91 ч. упражнения), Възобновяеми енергийни суровини (150 ч. упражнения), Металокомплексна и междуфазова катализа (270 ч. упражнения), Кинетични методи за избор на реакционния блок (60 ч. лекции, 270 ч. упражнения ), Фин органичен синтез (90 ч. лекции, 375 ч. упражнения), Инженерни решения за чисти и безопасни технологии (30 ч. лекции, 30ч. упражнения). Четирима дипломанти са изработили дипломните си работи под ръководството на д-р Танков.

**Прави впечатление, че научните публикации на д-р Танков са на изключително високо ниво, въпреки натоварената му преподавателска дейност.**

#### **5. Научни приноси**

##### **5.1.Хабилитационен труд**

Хабилитационният труд е изграден върху 5 статии, като четири от тях са категоризирани в квартила Q1 и една в Q2 (статии 1,2,3,4 и 5 от Списъка на научните публикации на кандидата).

В тази част са включени научните трудове, насочени към получаване и охарактеризиране на нови активни и стабилни хомогенни и хетерогенни катализатори за естерификация. Синтезирани са следните хомогенни катализатори: пиридинов хидрогенсулфат (PHS), пиридинов дихидрогенфосфат (P2HP), пиридинов нитрат (PN), 4-амино-1H-1,2,4-триазолов нитрат (ATN). На тяхна основа чрез използване на



носители с развита специфична повърхност –  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , пепел от оризови люспи (RHA) и активен въглен (AC) са получени хетерогенни системи (PHS/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ , PHS/RHA, xPHS/AC). Получените катализатори са изследвани с набор от модерни физико-химични методи като рентгеноструктурен и рентгенофазов анализ, рентгенова фотоелектронна спектроскопия (XPS), инфрачервена спектроскопия (FT-IR), спектроскопия в ултравиолетовата и видима области (UV-vis), термогравиметричен анализ (TGA), диференциално сканираща калориметрия (DSC), адсорбционна порозиметрия (SBET).

Каталитичната активност на синтезираните образци е изследвана в процесите на получаване на бутилацетат и метилолеат (биодизел). Статиите отнасящи се до получаването на биодизел са включени в критерий Г.

Особено положително намирам факта, че освен пълно охарактеризиране на катализаторите, са представени механизми на реакцията на естерификация и на базата на тези механизми, са изведени математични модели за изследване кинетиката и термодинамиката на получаване на целевите продукти. Съществен дял от представените трудове заема квантово-химичен (DFT) анализ върху термичните и каталитичните свойства на образците като функция от тяхната молекулна геометрия, електронна структура и вътрешномолекулни взаимодействия. Тоест направено едно пълно и комплексно изследване на каталитичните материали.

Както добре е известно, естерификацията протича в присъствие на киселинен катализатор посредством образуване на активен комплекс (преходно състояние) от взаимодействието катализатор-субстрат. Поради което, за да се добие представа за каталитичното поведение на йонните течности в реакциите на синтез на бутилацетат (PHS, P2HP, ATN, TAHSSM и PN) е извършен детайлен анализ на тяхната електронна структура).

Установено е, че с нарастване степента на киселинност на йонните течности ATN, PN, P2HP и PHS се увеличава и каталитичната активност в реакцията на естерификация. Получените доказателство са както посредством теоретични методи, така и чрез експериментални. Детайлен анализ на чистите атомни заряди показва, че центърът с най-висок положителен заряд в структурата на PHS, P2HP е водородният атом, свързан под формата на хидроксилна група в  $[\text{HSO}_4]^-$  и  $[\text{H}_2\text{PO}_4]^-$ . При ATN и PN, е показано, че водородният атом, локализиран при азотния атом в ароматния пръстен притежава най-ниска електронна плътност (висок положителен заряд). Установено е, че електронната плътност, локализирана върху водородни атоми намалява в реда  $\text{ATN} (+0.430) > \text{PN} (+0.463) > \text{P2HP} (+0.469) > \text{PHS} (+0.476) \approx \text{TAHSSM} (+0.479)$ . Тъй като ниска електронна плътност (значителен положителен заряд) съответства на висока степен на киселинност, теоретично изчисленият ред на нарастване на чистите атомни заряди показва пълно съвпадение с експериментално установената каталитична активност. Горният ред на нарастване на степента на киселинност е получено и експериментално.

С цел оптимизиране на условията на естерификация са проведени експериментални, кинетични и термодинамични изследвания. Установено е, че с нарастване съдържанието на катализатор добивът на естер и скоростната константа на естерификация нарастват в резултат на повечето на брой активни центрове.

Фактът, че ентропията на активация е отрицателна величина, е доказателство, че механизмът на формиране на бутилацетат и метилолеат включва образуване на активен комплекс, а теоретични изчисления показват, че формирането на преходното състояние е следствие от взаимодействие между водородния атом от катализатора, който е с максимален положителен заряд и кислорода под форма на  $\text{C}=\text{O}$  група в структурата на карбоксилната киселина.



При хетерогенните катализатори добивът на бутилацетат нараства в реда 27% (PHS/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) < 45% (PHS/AC) < 51% (PHS/RHA), което съвпада с реда на намаляване на размера PHS частиците.

Като основни приноси от хабилитационния труд могат да се посочат следните:

- За пръв път йонни течности пиридинов дихидрогенфосфат (P2HP), пиридинов нитрат (PN), 4-амино-1H-1,2,4-триазолов нитрат (ATN), чисти или нанесени върху носители с висока повърхност, са използвани като каталитични системи в реакции на естерификация.
- За пръв път е показан механизъм на получаване на бутилацетат, включващ формиране на активен комплекс с участие на йонна течност (PHS) като катализатор.
- Установени са оптималните условия за получаване на бутилацетат и метилолеат в присъствие на PHS, ATN и PN посредством кинетичен и термодинамичен анализ.

По данни на кандидата са забелязани 36 цитата на публикациите включени в хабилитационния труд.

### 5.2. Други публикации

В тази част са представени публикации, отнасящи се към показател Г (Научна публикация в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science и/или Scopus), извън хабилитационния труд). Общият брой точки е 245 т. (при необходимости 200 т.). Забелязани са общо 100 цитата на тези трудове. Тук могат да се разграничат три основни направления:

- Получаване на нови йонни течности и изследване на техният състав и структура;
- Анализ на повърхностни явления, протичащи при хетерогенизирани йонни течности;
- Изследване кинетиката на термично разлагане на йонни течности.

Като основните приноси, според мен, са изложени последователно по-долу.

За пръв път е синтезирана йонната течност пиридинов дихидрогенфосфат (P2HP) и е установена нейната молекулна геометрия, както и за пръв път е документирана ароматност на неорганичен анион в структурата на йонни течности.

За първи път са получени хетерогенни катализатори на основата на йонни течности и носители с високо развита повърхност – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, пепел от оризови люспи (RHA) и активен въглен (AC). Определен е фазовия състав, специфичната повърхност, разпределението на порите по размер, изчислен е размерът на частиците йонна течност, присъстващи на повърхността на носителя. Установени са промени във фазовия състав след импрегниране на  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, RHA и AC с воден разтвор на йонна течност (PHS). Установени са различен тип PHS частици в зависимост от носителя. На повърхността на  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> присъстват агломерати от PHS частици със среден размер 31.5 nm, докато агломерати от PHS не са регистрирани на повърхността на RHA. При носител AC са наблюдавани PHS кристали с размер от 6.3 до 14.8 nm в зависимост от количеството нанесен PHS.

Като основни постижения в тематично направление „Анализ на повърхностни явления, протичащи при хетерогенизирани йонни течности“, могат да се посочат следните:

- За пръв път са изследвани вибрационните ивици в йонните течности PHS и TAHSSM и получените на тяхна основа хетерогенни системи (PHS/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, PHS/RHA TAHSSM/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и xPHS/AC).



- Изяснена е природата на повърхностните взаимодействия в PHS/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, PHS/RHA TAHSM/ $\alpha$ - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и xPHS/AC като функция от природата на носителя и е установено пространственото разположение на имобилизираната активна фаза на повърхността на носителя при системите PHS/ $\alpha$ - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, PHS/RHA и xPHS/AC.

В следващото тематично направление са групирани изследвания на кинетиката на термично разлагане на йонни течности. В представените публикации са за първи път са показани изследвания на термичното поведение на следните йонните течности: PHS, P2HP и PN, както и на получените на тяхна основа хетерогенни системи (PHS/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и PHS/RHA). Установени са механизмите на топене и разлагане на образците като функция от степента на вътрешномолекулно водородно свързване и природата на носителя. За пръв път е изследвана кинетиката на термично разлагане на пиридинов нитрат.

## 6. Научно-приложна дейност

Научно-приложната дейност се изразява в защитен един полезен модел, за който е налично Свидетелство за регистрация в патентното ведомство на Република България (Рег. № 4007 U1). Полезният модел се отнася за индикатор на температурата с термохромен състав за директно прилагане върху човешката кожа с цел продължително наблюдаване на телесната температура и своеобразна визуализация и индикация.


## Заклучение

Познавам лично кандидата, поради това че той беше редовен докторант в Институт по катализ-БАН. Впечатленията ми за него са че той се отличава с изключителна трудолюбивост, дисциплинираност и всеотдайност към работата. Може да работи в колектив със собствен принос и идеи. Представените ми за рецензия научни трудове показаха значително израстване на кандидата в научно отношение. Впечатлена съм от обема на извършените изследвания, което е индикация за трудолюбивост и отдаденост на научните търсения.

Научните изследвания на **гл. ас. д-р Ивайло Георгиев Танков** изцяло отговарят на тематиката на обявеният конкурс за присъждане на академична длъжност „доцент”. Публикационната дейност и цитатите върху публикуваните резултати доказват, че **гл. ас. д-р Ивайло Танков** напълно покрива и надвишават 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 Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас. Поради това, убедено препоръчам на членовете на уважаемото научно жури да присъдят на **гл. ас. д-р Ивайло Георгиев Танков** академичната длъжност “доцент” в професионално направление 4.2 „Химически науки” и научна специалност „Химична кинетика и катализ”.

София, 18.03.2022 г.

Подпис:

/проф. д-р  Годорова/