

Кратка информация

за проф. дхн Георги Николов Вайсилов
за участие в обявения конкурс за член-кореспонденти (дописни членове) на Българската
академия на науките по Химически науки

Обща информация

Автор на **136 научни публикации**, от които **124** в международни научни списания с импакт фактор, 5 глави от книги на международни издателства.

През **последните пет години** (от 2016 г. насам): **32** научни публикации в списания с импакт фактор. Сред тези публикации са статии в престижни научни списания: *Nature Materials*, *Angew. Chemie*, *ACS Catalysis*, и др.

Общ брой цитирания на публикациите (без самоцитиранията на всички автори): **4030**.

H индекс: 30.

Сред първите 2% от водещите учени в света според публикация на автори от Университета Станфорд.

7 защитили докторанти, двама от които са **професори**, двама са главни асистенти, а трима работят в индустрията или в чужбина.

Координатор на общи проекти на Факултета по химия и фармация и на Софийския университет, финансирани от Европейската комисия (по програмата TWINNING) и от МОН (по програмата Европейски научни мрежи).

Председател и заместник-председател на Изпълнителния съвет на Фонд „Научни изследвания“, в 2015-2017 и 2017-2018, от септември 2018 г. - управител на ФНИ.

Награди „Питагор“ за утвърден учен в областта на природните науки и математиката (2013) и за ръководител на успешни международни проекти (2018).

Участие в дейността на българската и международната научна общност (през различни периоди):

- председател на Хумболтовия съюз в България,
- председател на Българската зеолитна асоциация;
- президент на Федерацията на Европейските Зеолитни Асоциации (FEZA);
- член на Изпълнителния съвет на Европейската Научна Фондация (ESF);
- член на програмния комитет на рамковата програма Хоризонт Европа за Европейския изследователски съвет.

Области на научните приноси

Квантово-химично моделиране на структурата, спектралните характеристики и реакционната способност на различните типове химични системи и материали:

- Хетерогенни катализатори и каталитични системи;
- Активни центрове и дефекти в зеолити, микропорести материали и метал-органични структури;
- Екологични катализатори и адсорбенти;
- Наноструктурирани материали;
- Функционални органични и биоорганични молекули и системи;
- Системи за доставяне на лекарства.

Превръщане на квантово-химичното моделиране в практически инструмент за изследване на каталитични системи и материали

Основната част от научните ми изследвания са в областта на **квантово-химично моделиране на каталитични системи и материали** – направление, което моята изследователска група успешно развива през последните 20 години в синхрон с развитието на изследванията в Европа и света. В крак със световните тенденции, нашите изследвания не са изолирани и ограничени в рамките на теорията, а са **директно свързани с важни експериментални проблеми, които не могат да бъдат еднозначно решени** само на основата на съответните експериментални изследвания. По този начин, аз и моите сътрудници **помогнахме квантово-химичното моделиране да се превърне в практически инструмент в изследването на катализатори и подобни на тях материали**. Подходът, който постепенно развихме, цели резултатите от теоретичното моделиране да бъдат реални и сравними с експерименталните системи и условия, на основата на баланс между реалистични изчислителни модели, коректни квантово-химични методи и налични изчислителни ресурси. Използвайки уникалните възможности на квантово-химичното моделиране, ние симулираме не само системи, съответстващи на предлаганите преди интерпретации, но разглеждаме множество нови алтернативни обяснения, които не противоречат на експерименталните резултати. Особеност на изследователския ни подход е специалното внимание към възможни дефекти и влияния на носителя или средата върху активните центрове, за разлика от значителна част от изчислителните изследвания, които все още се симулират идеализирани модели. Този подход ни доведе до **редица успехи за различни каталитични системи, при които обяснихме експериментално наблюдаваните структурни или спектрални особености**. Още повече, за няколко от моделираните

проблеми и системи достигнахме до извода, че публикуваните интерпретации на експерименталните резултати не са коректни и след анализ и моделиране на множество алтернативи, предложихме и обосновахме нова интерпретация на експеримента, която го обяснява по-пълно. При всички такива случаи, нашата интерпретация беше доказана от експериментални групи от страната или от чужбина - Германия, САЩ, Чехия и др.

Конкретните нови интерпретации са:

- Коригиране на отнасянето на експериментално наблюдавана ивица в **ИЧ спектър на родиев монокарбонил в зеолит**;
- Установяване на **преноса на протони от носителя (зеолит) към металния клъстер** при клъстери на преходни метали в зеолити и отхвърляне на предишната експериментална интерпретация, че клъстерите са чисти;
- Доказване на **преноса на кислород от носителя (цериев диоксид) към металния клъстер** при платинов клъстер върху цериев диоксид когато носителя е **наноразмерен** и доказване, че предишната интерпретация, че този процес е енергетично неизгоден е вярна само за големи частици от носителя;
- Доказване, че причината за появата на специфична ивица в спектъра на СО в мед-съдържащ MOF е **дефект в структурата или повърхността на частицата**, а не примеси в материала;
- Изясняване на **реалната структура на серия от повърхностни карбонати, хидрогенкарбонати, формиати, нитрити и нитрати върху оксидни повърхности**, експериментално изследвани чрез инфрачервена спектроскопия;
- Установяване на структурата и разположението на **два нови типа частици върху цериев диоксид** – азиди и NO^{2-} ;
- Изясняване на **типа и окислителното състояние на паладиеви, платинови, родиеви и др. метални центрове в зеолити**, участващи в процесите на сорбция и конверсия на азотни оксиди и въглероден диоксид.