

Рецензия

от

доц. д-р Николай Александров Грозев, ФХФ – СУ „Св. Климент Охридски“,

Катедра „Физикохимия“

Относно: Конкурс за заемане на академична длъжност „доцент“, област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки (Химия на твърдото тяло), обявен в ДВ бр. 65 от 28.07.2023 г; Заповед на Ректора на СУ „Св. Климент Охридски“, РД – 38 – 526 / 01. 09. 2023 г. и решение на ФС – ФХФ, протокол № 28 / 25.08.2023 г.

За конкурса, обявен в ДВ (бр. 65 от 28.07.2023 г) за академичната длъжност „доцент“, единствен кандидат е гл. ас. д-р Веселина Точева Рангелова от Катедра „Приложна неорганична химия,“ към Факултета по химия и фармация при СУ „Св. Климент Охридски“. Д-р Веселина Рангелова е представила в електронен вариант цялата необходима информация, съгласно действащата нормативна база (ЗРАСРБ, Правилник за прилагането на ЗРАСРБ, Правилник за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“ и Препоръчителни критерии при придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“ за професионални направления 4.2 „Химически науки“ и 7.3 „Фармация“ на ФХФ).

1. Кратки биографични данни за кандидата

Д-р Веселина Рангелова завършва висшето си образование през 1996 г. във Факултета по химия и фармация (тогава Химически факултет) като магистър по химия (със специализация: Особено чисти вещества и материали на тяхната основа). През 2004 г. защитава докторска дисертация пред Висшата атестационна комисия и придобива образователната и научна степен „Доктор“ по научната специалност 01.05.18 Химия на твърдото тяло. Темата на дисертационния труд е "Аморфни и нанокристални Mg-Ni сплави за съхранение на водород". След успешната защита започва работа в Катедра „Приложна неорганична химия“ към Факултета по химия и фармация при СУ на длъжност (последователно) асистент – старши асистент и главен асистент. Научните интереси на д-р Веселина Рангелова са в областта на материалознанието, катализата и неорганичния синтез.

2. Научноизследователска дейност на кандидата

Д-р Веселина Рангелова участва в написването на 18 научни труда (15 – в реферирани в системата Scopus, две в списания без импакт фактор, квартил или SJR и една статия в сборник на конференция). Общият брой цитати на всички научни трудове на д-р В. Рангелова е 174 цитата по Scopus и h-индекс 5. Ръководител е на три вътрешни проекта към Фонд научни изследвания на СУ и е участник в 7 проекта (2 международни, 4 национални и 1 вътрешен към СУ). Научните резултатите са представени на 6 секционни доклада.

3. Преподавателска дейност и работа със студенти

Освен научно-изследователската работа д-р Веселина Рангелова участва активно и в преподаването във ФХФ – води лекции и практически занятия по Неорганични химични технологии за бакалавърски специалности Химия, редовно и задочно обучение; както и на Химични технологии за специалност Инженерна химия и съвременни материали, редовно обучение. Преподавателската ѝ дейност е свързана и с работа със студенти и докторанти, което се вижда от научното ѝ ръководство на три дипломни работи на студенти, както и с участието ѝ в авторски колективи за написването на един учебник и учебно помагало за ученици от 10-ти клас от средното образование.

4. Оценка на материалите за участие в конкурса за длъжността „доцент“

В конкурса В. Рангелова участва с хабилитационен труд – монография (дадена за печат в Университетско издателство на СУ) и 14 научни публикации (изброени във файл „10V.SelectedPublicationsList.pdf“) – 12 в реферирани и индексирани списания и 2 в списания без IF (Q или SJR, а именно номер 11 в Годишник на Софийски университет „Св. Кл. Охридски“ Факултет по химия и фармация, 2009 и номер 10 в Nanoscience & Nanotechnology (2015)). Научните трудове са разпределени както следва: 3 (Q1), 4 (Q2), 5 (Q3). Съавтори на д-р В. Рангелова са учени (вкл. студенти) от Факултета по химия и фармация, Българската академия на науките и от чужбина. Общият брой цитати върху статиите, представени за участие в конкурса е 48. Общият брой цитати на всички научни трудове на д-р В. Рангелова е 174 цитата по Scopus и h-индекс 5.

Хабилитационният труд (група от показатели В), както и 12-те публикации (всички в група от показатели Г) са посветени на съвременни научни теми като

развитието на нови материали за: 1. съхранение на водород, 2. съхранение на енергия (батерии за многократна употреба) и 3. катализатори за твърди горива. Това е тематиката на изследвания на д-р В. Рангелова през дългогодишната ѝ кариера в Катедрата „Приложна неорганична химия“, започнала с докторската ѝ дисертация. Този факт сам по себе си говори, че за този период от време тя се е формирала като специалист в тази област.

4.1. Хабилизационен труд (Група от показатели В)

Хабилизационният труд е предаден за печат в Университетското издателство на СУ, което е удостоверено със служебна бележка. Има издаден ISBN 978-954-07-5810-7. Служебната бележка е придружена и с изискваната рецензия, в случая от специалист в областта проф. Георги Цветков. Трудът се състои от 127 страници (без заглавните страници и съдържанието – 120 стр.) и отговаря на изискването да е над 100 стр., както и за наличието на определения брой символи на страница (осреднено). Има само 5 фигури, което може би е малко пестеливо.

Хабилизационният труд е увлекателно написан без при това да се губи последователност или научна точност и е базиран на огромен брой цитирани източници – 282, при това преобладаващата част са статии от последните 15 години. Заглавието е „MOFS. Съхранение на газове в порести материали“. MOFS е съкращение на Metal Organic Frameworks, това са съвременни синтетични материали за съхранение на водород, въглероден диоксид и на фосилни горива в газообразно агрегатно състояние. Също така може да се използват за пречистване на газообразни смеси. Тези материали позволяват предварително да бъде зададена структура, която да има желаната порьозност и съотношение на кристална (наличие на далечен порядък) към аморфна част (наличие на близък порядък), т.е. да се получи една гъвкава структура „в която няма неплезни обеми“ (цитат). Това е следствие на взаимодействието на метални йони и органични разделители („линкъри“) в състава им. При това предварително целенасочено може да се въведат определени функционални групи в порите, които да взаимодействат с конкретна гост-молекула. Така метало-органичните мрежести материали проявяват високи селективност и капацитет на задържане в процесите на съхранение или разделяне на газообразни смеси. Тематиката е от края на 20-ти век и началото на 21-ви век, т.е. научните търсения на д-р В. Рангелова и съавтори са в една бурно развиваща се модерна и силно конкурентна среда, и допринасят за получаването на нови факти, обогатяване

на съществуващите знания и теории, като имат непосредствени възможности за приложение в практиката.

Работата е много добре структурирана и позволява много лесно да се ориентира и неспециалист. В уводната част се мотивира написването на настоящата монография и ясно се посочва мястото ѝ в научната литература – „...да представи съвременния напредък и основните проблеми в тази все още развиваща се изследователска област, както и да очертае възможни стратегии за подобряването сорбционните характеристики на този нов клас материали.“. Считам, че поставената цел е постигната убедително и монографията си е заслужила своето право на съществуване.

Следва глава „Съхранение на газове в твърда фаза“ – едно по-общо описание за нуждата от съхранение на газове в порести тела, както и кратък исторически преглед на порестите тела – зеолити, порести координационни полимери и метал-органични мрежести материали, т. нар. MOFs,

Вече подготвен с базовите знания, в следващите две глави читателят преминава към запознаване с конкретни примери на приложение на MOFs – съхранение на водород и на въглероден диоксид. Всяка една глава е написана самосъгласувано, т.е. проблемът е разгледан от самото начало (нуждата да се съхраняват тези газове), начините на получаване (съответно улавяне), описание на по-конвенционални материали за съхранение и накрая MOFs – тук се обръща внимание на сорбционните процеси и методите за тяхното охарактеризиране, дизайнът им (въз основа на различни съединения) и завършва със стратегии за подобряване на капацитета на тези материали.

Хабилитационният труд би могъл да бъде от полза както на неспециалисти с интерес в областта, така и на специалисти (поради наличието на богат и достоверен източник за направеното до момента).

4.2. Статии (Група от показатели Г)

Статиите, представени в конкурса са различни от статиите, използвани за придобиване на научната и образователна степен „доктор“ през 2004 г.

Статиите са разделени в 2 групи, което отговаря на научните интереси на кандидата: първата и основна група се отнася до аморфни и кристални материали с потенциал за съхранение на водород в твърда фаза – включват се метални сплави (статии 3, 6-9, 13, 14) и MOFs (статии 10, 11 и 12), в допълнение статия 4 включва други

функционални материали – стъкла (сплави) на основата на Zr; втората група е посветена на каталитично разлагане на амониев перхлорат (статии 1, 2 и 5). Всички те „...включват синтез на нови материали с определени функционални свойства, тяхното морфологично, микроструктурно и термично характеризиране, както и определяне на съответните техни свойства, водещи до практически приложения.“. Използвам цитат от текста на кандидата защото той (цитатът) много точно и ясно определя същността на научните трудове.

За нуждите на синтеза са използвани различни техники, някои от тях са били иновативни за времето си – свръх-бърза закалка от стопилка (10^5 - 10^6 K/сек), механично сплавяване и реактивно механично сплавяване с помощта на топкови мелници и високочестотно индукционно топене. За микро-структурно охарактеризиране на образците са използвани методи като трансмисионна електронна микроскопия, сканираща електронна микроскопия, рентгенова и електронна дифракция, динамична сканираща калориметрия, термогравиметрия. За изследването на водород-сорбционните свойства са използвани подходящи методи – при насищане от газова фаза, така и в електрохимични условия.

За съжаление от статиите, посветени на MOFs само една статия (12) носи точки в конкурса. Другите две статии (10 и 11) са представени за пълнота защото все пак съдържат интересни резултати.

4.2.1. Основни резултати

Следват някои от научните приносите, които ми направиха най-голямо впечатление.

4.2.1а. Материали с потенциал за съхранение на водород в твърда фаза

Изследванията върху водород-сорбционните свойства на материалите, характеризиращи се наличието на аморфна и нанокристална структура целят установяване на зависимост между морфологията на сплавите, микроструктурата им и техния капацитет, както и кинетика на хидриране/дехидриране.

Статия 3 – интересен факт е, че малки разлики в състава на сплавите не води до промяна на параметрите на кристалната решетка на LaNi_5 , но някои електрохимични характеристики се оказват чувствителни – така например при сплавите с по-ниско съдържание на Al ($x = 0.04..0.08$) е измерен по-висок капацитет (или с увеличаване на съдържанието на Al, капацитетът на батерията намалява), което е характерно и за сплави

с много по-високо съдържание на Al ($x > 0.1$). При всички, капацитетът намалява след провеждането на 50 цикъла зареждане/разреждане.

В **Статия 12** са представени изследванията на термичните и водород-сорбционни свойства на новосинтезирани MOFs на Cu-4,4'-(перфлуоропропан-2,2-диил)дифталова киселина. Установено е, че използването на $\text{Cu}(\text{OH})_2$, води до формирането на продукт с по-висока скорост и стабилност.

Статия 14 включва резултатите, получени при хидриране на бързо охладени аморфни сплави $\text{Ni}_{81.5}\text{V}_{18.5}$ и Fe-B-Si. Установено е, че аморфната Ni-B сплав абсорбира по-големи количества водород в сравнение с металното стъкло на основата на Fe-B-Si, като първоначалната кинетика на абсорбция и десорбция на водород за двете сплави е сравнима (което много ясно се вижда от Фиг. 2 от статия 14).

4.2.16. Материали за каталитично разлагане на амониев перхлорат

Прави впечатление, че мезопорестите материали, служещи за катализатори на разлагането на амониевия перхлорат имат морфология на видове от флората. Може би тази прилика е необходимо условие за проявата на каталитични свойства?

В **Статия 1** са получени субмикронни частици от $\beta - \text{Ni}(\text{OH})_2$ с форма на роза (пясъчна). Установено е, че добавянето на 5 % (тегловни) от $\beta - \text{Ni}(\text{OH})_2$ към амониев перхлорат значително понижава температурата на разлагане (с около 69 градуса), отделената топлинна енергия е почти два пъти по-голяма в сравнение с чистия амониев перхлорат.

Статия 5 е посветена на синтеза и охарактеризирането на нови мезопорести карфиолообразни структури, състоящи се от агрегирани наночастици $\text{CuO}/\text{Cu}(\text{OH})_2$. Показано е, че новият материал проявява отлична каталитична активност по отношение разлагането на амониев перхлорат близка до тази на най-добрите медни катализатори.

5. Критични бележки и препоръки по представените трудове

Забележка: Публикация 1 във файловете „17.PublicationsSummary.pdf“ и „10B.SelectedPublicationsList.pdf“ е „Sand-rose shaped $\beta\text{-Ni}(\text{OH})_2$ microspheres...“, докато в документа „14.Contributions.pdf“ като публикация 1 се разглежда „Mesoporous cauliflower-like $\text{CuO}/\text{Cu}(\text{OH})_2$ hierarchical structures“ (която е всъщност публикация 5, т.е.

в „14.Contributions.pdf“ е сменена номерацията на публикация 1 и 5), което не променя по същество разглеждането.

Често във формулите индексите не са поставени като индекси.

Литературните източници в раздел „Литература“ на хабилитационния труд са форматирани по различен начин (виж например [14] и [15], [218] и [219]) и често съдържат като цитат не само един източник, а няколко различни (например [239] съдържа източник [240]). Появява се източник [29] между [253] и [254] и т.н.

В един текст неминуемо има печатни грешки. Например:

Стр. 11 – „Лабораторно, синтетични зеолити са получени едва в средата на 20 век, като специфичната им структура се **охарактеризира** с развитите вече дифракционни методи за анализ [9, 10].“

Стр. 13 – „...характеристики на порестата им структура спрямо свойствата на конкретната молекула, **която има да бъде** адсорбирана.“

Стр. 49 – „**водород** – влияние на катализатор, полярност на връзките и т.н.“

Съветът ми е, ако има възможност хабилитационният труд да бъде поправен преди отпечатването, тъй като само би спечелил от поправките.

6. Въпроси

Във връзка с факта (установен в статия 3), че малки количества алуминий променят електрохимичните свойства на сплавите, при процедурата на смилане на частиците до нано-размери с помощта на топкови мелници с топки от стомана не се ли отделят малки количества желязо/въглерод, които да повлияват поведението на сплавите?

7. Заключение

Може да се обобщи, че по отделните минимални национални изисквания д-р В. Рангелова показва следните резултати (Група от показатели):

А. (докторат), 50 точки, при необходими 50 точки

В. Хабилитационен труд, 100 точки, при необходими 100

Г. Научни публикации извън хабилитационния труд, 230 точки, при необходими 220

Д. Цитирания /SCOPUS/, 348 точки, при необходими 70. Уточнение: тук са включени всички цитати до сега, не само на представените 12 статии (с 48 цитата), но и с тях пак се надхвърлят изискванията.

Ж. h-индекс = 5, участие в проекти, въведени нови курсове, дипломанти – 155 точки, при необходими 70.

Трябва да се отбележи и участието на д-р В. Рангелова в написването на учебник и учебно помагало за ученици от 10-ти клас от средното образование, тъй като е много важно специалисти да могат да предадат своите знания на разбираем език за учащите си и така да формират толкова необходимата за бъдещите научни изследователи любознателност и интерес към предмета „Химия“.

В заключение, изразявам своята вътрешна убеденост, че гл. ас. д-р Веселина Точева Рангелова отговаря на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и останалите нормативни документи. Във връзка с това препоръчвам гл. ас. д-р Веселина Точева Рангелова да заеме академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки (Химия на твърдото тяло).

София, 14.11.2023 г.

Подпис:

/доц. д-р. Николай Грозев/