

СТАНОВИЩЕ

за дисертационен труд

на тема: "Синтез и структура на кристалохидрати и уреати на магнезиеви соли"
на Красимир Косев**Изготвил становището:** Проф. д-р Ирина Караджова – Факултет по химия и фармация на Софийски Университет "Св. Климент Охридски"

Магнезият, осмият по разпространение на земята елемент, е есенциален елемент, участва в редица метаболитни процеси, активатор е на обмяната на веществата и необходим за дейността на около 300 ензима. Някои от съединенията му са с широко приложение в практиката и се произвеждат в значителни количества. Обект са на проучвания от по миналия век, в резултат на което е натрупан значителен експериментален и теоретичен материал, но изследванията продължават, особено след като е установено, че сулфати на магнезия и калция се срещат на повърхността на Марс. По отношение на хлоратите на Mg и уреатите на магнезиевия сулфат или магнезиевия хлорат дори липсват достоверни данни за кристалната им структура. В този дух са поставени идеите, целите и задачите на представената за рецензия дисертация. Основната цел е структурни изследвания на кристалохидрати и уреати на две магнезиеви соли – магнезиев сулфат и магнезиев хлорат. За постигане на тази цел дисертантът успешно се е справил с изпълнението на няколко задачи:

- Критичен анализ на процедурите, предлагани в литературата за синтез на магнезиев хлорат и предложение на нова, усъвършенствана процедура за получаване на продукт, чист от съпътстващи реагенти. Предлаганата процедурата е с възможности за промишлено приложение.
- Установяване на структурата на хидрати на магнезиев хлорат
- Синтез на уреати на магнезиев сулфат и магнезиев хлорат
- Установяване на структурата на получените уреати и оценка на стабилизиращи фактори.

За решаване на поставените задачи са използвани съвременни методи – рентгенофазов и рентгеноструктурен анализ, комбинирани с ИЧ спектроскопия, диференциално термичен анализ и термо гравиметричен анализ.

Експерименталната работа за изпълнение на поставените задачи е проведена прецизно и е получен значителен обем научни резултати. Трябва да се подчертае, че дисертантът е с дългогодишна практика по приложението на използваните инструменталните методи, което дава възможност да се получи максимално пълно охарактеризиране на изследваните съединения. Дисертационният труд е оформен на 94 страници и съдържа 14 фигури и 20 таблици, цитирани са 90 литературни източника. Представената дисертация представлява едно завършено изследване, в което е показана връзката между целевия синтез, структурата и свойствата на получените продукти. Основните научни приноси на дисертационния труд имат научно-приложен характер и могат да бъдат обобщени както следва:

- Разработени са схеми за получаване на хидрати/уреати на магнезиев хлорат с висока чистота и минимизирано съдържание на съпътстващи реагенти. Оценено е влиянието на фактори като температура, разтворител, съотношение на реагентите върху състава на продуктите на взаимодействието.
- Определена е структурата на два кристалохидрата на магнезиевия хлорат – $\text{Mg}(\text{ClO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Mg}(\text{ClO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Показано, е че и при двете форми, Mg е октаедрично координиран с участието на кислорода от молекулите на кристализационната вода при хексахидрата или с участие на кислородни атоми на хлоратния анион (4 позиции) и водните молекули (2 позиции) при дихидрата. Показан е мотивът на водородните връзки и при двете съединения, които стабилизират тримерната структура.
- Изследвано е поведението на системата магнезиев сулфат/карбамид/вода при различно съотношение на реагентите. Образуват се поне три фази, уреати на магнезиевия сулфат, които са охарактеризирани с подходящи инструментални методи. Получени са монокристални образци и са охарактеризирани магнезиев сулфат тетрауреа монохидрат, $\text{MgSO}_4 \cdot 4\text{U} \cdot \text{H}_2\text{O}$ и магнезиев сулфат хексауреа семихидрат, $\text{MgSO}_4 \cdot 6\text{U} \cdot 1/2\text{H}_2\text{O}$. Показано, е че и при двете съединения, Mg е октаедрично координиран с участието на кислорода от молекулите на карбамида, кислорода от молекула вода и кислородния атом на сулфатния йон за тетрауреата и само кислородните атоми на карбамида са хексауреата. Показана е геометрията на образуваните водородни връзки с участието на протоните от amidната група и кислородните атоми на кристализационната вода и сулфатния анион.
- Изследвано е поведението на системата магнезиев хлорат/карбамид при различно съотношение на реагентите от 1/1 до 10/1. Представено е детайлно проучване на получаваните съединения. Получен е монокристален образец и е охарактеризирана кристалната структура на магнезиев хлорат хексауреат $\text{Mg}(\text{ClO}_3)_2 \cdot 6\text{U}$. Показано, е че Mg е октаедрично координиран с участието на кислорода от молекулите на карбамида. Показана е геометрията на образуваните водородни връзки с участието на протоните от amidната група и кислородни атоми на хлоратния анион.

Описаните в дисертацията изследвания са проведени прецизно, дисертантът владее и прилага съвременните методи за пълно охарактеризиране на материали. Получените резултата са интерпретирани правилно. Стилът на изложението е ясен, точен и логичен.

Основните резултати от проведеното изследване са оформени и отпечатани в 3 научни публикации в Acta Crystallographica, Section C, дисертантът е докладвал резултатите от дисертационния труд на 2 научни конференции. Забелязани са 29 цитата на публикуваните статии. Независимо, че дисертантът не е първи автор в представените публикации, приносът му е несъмнен. Получаването и интерпретациите на получените резултати до голяма степен са негово оригинално постижение.

Представеният дисертационен труд "Синтез и структура на кристалохидрати и уреати на магнезиеви соли" напълно отговаря на изискванията на Правилника за

условията за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в Института по минералогия и кристалография „Акад. Иван Костов“-БАН, прави много добро впечатление с разнообразието на използваните методи и критична интерпретация на данни и предлагам на уважаваното Научно жури да присъди образователната и научна степен „доктор“ на Красимир Косев.

11.06.2017
София

РЕЦЕНЗЕНТ:

/проф. д-р Ирина Караджова/