

Рецензия

на материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. „Химически науки“ (*Химия на твърдото тяло, наноразмерни материали и минерали*) за нуждите на направление „Структурна кристалография и материалознание“ при ИМК-БАН, обявен в „Държавен вестник“ брой 106/15.12.2020 г.

Единствен кандидат в конкурса за „доцент“, обявен в „Държавен вестник“ брой 106/15.12.2020 г., е **главен асистент д-р Катерина Любомирова Захаријева**. Представеният от кандидатката комплект материали за участие в настоящия конкурс е в съответствие с изискванията на ЗРАСРБ и Правилника за неговото приложение, както и с изискванията на Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в БАН и ИМК при заемане на академичната длъжност „доцент“ в област на висше образование 4. „Природни науки, математика и информатика“ и професионално направление 4.2. „Химически науки“.

Справката за изпълнение на минималните национални критерии и тези на ИМК-БАН, при заемане на академичната длъжност „доцент“ показва, че кандидатката изпълнява, а по някои от показателите надвишава необходимия минимален брой точки както следва: по показатели от група „В“ при необходим минимум от 100 т., д-р Катерина Захаријева е постигнала 162 т., по показатели от група „Г“, при минимум от 220 т., - 304 т., а по група показатели „Д“, при необходим минимум от 60 т. - 168 т.

Общият брой научни трудове на д-р Катерина Захаријева е 69. От тях, за участие в конкурса тя е представила 54 научни публикации, които са по темата на настоящия конкурс (*Химия на твърдото тяло, наноразмерни материали и минерали*) и не повтарят представените за образователната и научна степен „доктор“ и тези използвани при заемане на АД „главен асистент“. 32 броя публикации (59%) са отпечатани в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science и/или Scopus), 29 (~54%) са в списания с импакт фактор и квантил (3 в Q1, 5 в Q2, 3 в Q3 и 18 в Q4 издания) и 3 са в списания без импакт фактор и с SJR. 22 публикации (~41%) са отпечатани в списания и издания без импакт фактор и без SJR. Д-р Захаријева е кореспондиращ автор в 21 публикации (~39%), първи автор в 25 публикации, втори автор в 24 публикации, трети автор в 1 публикация, четвърти автор в 2 публикации и пети автор в 2 публикации.

Общият брой на забелязаните цитати без автоцитиранията на всички автори, към момента на оформяне на документите за участие в настоящия конкурс, е 95 (според Scopus и Web of Science – 84). Индексът на Хирш, h, на кандидатката по отношение на публикациите включени в базата данни с научна информация Web of Science, е 5.

Д-р Захаријева е представила данни за впечатляващ брой участия в национални и международни научни форуми – 117. Представени са 41 постера на международни конференции, 40 постера на национални научни форуми, 4 от които с международно участие, 4 устни доклада на национални конференции, от които една с международно участие, 4 устни презентации на международни конференции, 4 постера и 6 устни доклада на семинари, 2 постера и 1 устен доклад на международно училище.

Гл. ас. д-р Катерина Захаријева е била ръководител на 1 проект финансиран от бюджетната субсидия на БАН (2018–2020 г.) на тема: “Синтез на оксидни материали с приложение във фотокатализа” и участник в 6 научни проекта, финансирани от български източници, от които един по Оперативна програма „Развитие на човешките ресурси” на Европейския социален фонд.

За участие в конкурса, гл. ас. д-р Катерина Захаријева е представила Хабилизационна авторска справка за приносния характер на публикациите по показател „В (т. 4)” и Авторска справка за приносния характер на публикациите по показател „Г (т. 7)”.

Хабилизационната авторска справка обхваща основно 11 научни труда и представя в детайли експерименталните изследвания на д-р Захаријева посветени на синтеза и охарактеризирането на голям брой наноразмерни материали на базата на метални оксиди и композити с интересни приложни свойства. Тези изследвания отразяват дългия път извървян от кандидатката, от оптимизиране на условията на специфичния насочен синтез, през детайлното охарактеризиране на новополучените оксидни материали, до изпитването на техните (фото)каталитични свойства. Изследванията на д-р Захаријева имат ясна и конкретна цел, която е постигната с много прецизни и изчерпателни експерименти.

Научните приноси на д-р Захаријева в публикациите по показател „В (т. 4)” се състоят в разработването на оптимална стратегия и уточняването на условията за синтез на различни наноразмерни метал-оксидни материали. В резултат на проведените експерименти са установени зависимости между условията на синтез, състава, стехиометрията, структурата и физикохимичните свойства на оксидните материали, от една страна, и каталитичните им характеристики от друга. Тези зависимости са използвани за получаването на образци с подобрени (фото)каталитични свойства. За охарактеризирането на новите наноразмерни материали д-р Захаријева е използвала подходящ набор от експериментални техники и методи, между които рентгенофазов анализ, ИЧ спектроскопия, СЕМ; определяни са текстурни характеристики, изчисляван е средния размер на кристалитите (D), параметъра на елементарната клетка (a) и степента на дефектност (ϵ). Изследванията на д-р Захаријева са доказали, че получените от нея оксидни наноразмерни образци са с много добри фотокаталитични свойства и са обещаващи каталитични материали. Новосинтезираните материали имат потенциал за приложение в каталитични процеси с отношение към екологията и опазването на околната среда.

Конкретните научни приноси на д-р Захаријева, свързани със синтеза и охарактеризирането на различни по състав наноразмерни материали, някои по-важни резултати и изводи от изследванията са представени накратко по-долу.

- Разработени са два оригинални метода за синтез на наноразмерни материали от магнезиев алуминат ($MgAl_2O_4$), които са охарактеризирани в детайли. Установено е влиянието на метода на синтез върху структурата, физикохимичните свойства и морфологията на магнезиевия алуминат. Новосинтезираният материал е подходящ като носител за катализатори участващи в каталитични процеси за опазване на околната среда.
- Получени са наноразмерни медни феритни материали ($Cu_xFe_{3-x}O_4$, $0 \leq x \leq 1$) чрез съутаяване и механохимична активация и/или термична обработка. Установена е зависимост на фотокаталитичната активност на синтезираните медни феритни материали от различната степен на внедряване на медните йони в магнетитовия тип структура. Синтезираните медни феритни материали са показали суперпарамагнитно поведение, притежават добри фотокаталитични свойства и са подходящи каталитични материали за почистване на води от Малахитово Зелено багрило.
- Чрез съутаяване са синтезирани наноразмерни смесени кобалт-медни феритни материали с различен стехиометричен състав: $Co_{0.25}Cu_{0.25}Fe_{2.5}O_4$, $Co_{0.4}Cu_{0.1}Fe_{2.5}O_4$ и $Co_{0.5}Cu_{0.5}Fe_2O_4$. Намерено е, че фотокаталитичната активност на тези образци зависи от степента на внедряване на металните йони в магнетитовия тип структура и от използваните методи за получаване. Намаляването на съдържанието на кобалт във феритните материали е довело до увеличаване на тяхната фотокаталитична активност. Получените смесени кобалт-медни феритни образци са подходящи каталитични материали за пречистване на води замърсени с азо багрилото Реактивно Черно 5.
- Предложени са два метода за синтез на еднофазен никелов ферит $Ni_{0.5}Fe_{2.5}O_4$: съутаяване и термична обработка и съутаяване и механохимична обработка. Показано е, че механохимичното третиране води до получаването на никелов феритен материал с по-добри характеристики: по-голяма специфична повърхност, по-висока дисперсност и по-добра фотокаталитична активност при разграждането на Малахитово Зелено багрило във водни разтвори под действието на УВ лъчение.
- Синтезирани са цинкови и манганови феритни материали ($Zn_xFe_{3-x}O_4$, $x = 0.5, 1$ и $Mn_xFe_{3-x}O_4$, $x = 0.25, 0.5, 1$) чрез съутаяване и механохимична обработка. Последната е довела до присъствие на феритна фаза и премахване на междинната фаза акагенит. Установено е суперпарамагнитно поведение на синтезираните феритни материали.
- Посредством съутаяване последвано от термична обработка са получени серии от наноразмерни заместени магнетитов тип материали нанесени върху активен въглен

от костилки на праскова ($\text{Cu}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4/\text{AC}$, $\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4/\text{AC}$, $\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4/\text{AC}$, $\text{Ni}_{0.25}\text{Fe}_{2.75}\text{O}_4/\text{AC}$, $\text{Ni}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4/\text{AC}$ и $\text{NiFe}_2\text{O}_4/\text{AC}$). Установено е влиянието на химичния състав, стехиометрията, размера на частиците и дисперсността върху каталитичната активност на образците.

- Получен е наноразмерен цинков оксид (ZnO) чрез утаяване последвано от термично третиране и механохимична обработка при вариране на параметрите. Данните от рентгенофазовия анализ са показали, че механохимичната обработка води до намаляване на средния размер на кристалитите (9.9 nm) в сравнение с изходния цинков оксид (14.6 nm). Фотокаталитични изследвания относно разграждането на Реактивно Черно 5 багрило като моделен замърсител във водни разтвори под действието на УВ лъчение са показали, че при оптимално време на смилане 15 минути е получен наноразмерен ZnO каталитичен материал с най-висока фотокаталитична активност ($k=35.5 \times 10^{-3} \text{min}^{-1}$).
- Чрез механохимична активация на дотиран с 5 тегловни процента сребро Al_2O_3 и алуминиев оксид е установено влиянието на механохимичната активация върху фотокаталитичната активност на образците. И в този случай механохимичното активиране подобрява фотокаталитичната ефективност на изследваните материали за разграждането на Малахитово Зелено и Реактивно Черно 5 багрила като моделни замърсители във водни разтвори под действието на УВ светлина. Активираният, дотиран с 5 тегловни процента сребро Al_2O_3 притежава най-висока фотокаталитична активност за окислителното разграждане на Реактивно Черно 5 и Малахитово Зелено (99% и 98%) в сравнение с образците, които не са механохимично третирани.
- Изучено е влиянието на типа прекурсори и температурите на термична обработка върху фотокаталитичната активност на композитни материали на основата на различни метални оксиди, получени чрез съутаяване последвано от термична обработка при различни температури: $\text{NiMnO}_3/\text{Mn}_2\text{O}_3$, $\text{NiMn}_2\text{O}_4/\text{NiMnO}_3/\text{Mn}_2\text{O}_3$, $\text{Ni}_6\text{MnO}_8/\text{NiMnO}_3/\text{Mn}_2\text{O}_3$.
- Чрез механохимично третиране са синтезирани различни по състав нанокompозити: $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2\text{-ZnO}$, $\text{TiO}_2\text{-ZnO}$ и $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$. Получен е нанокompозитен прах от $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2\text{-ZnO}$ посредством механохимична обработка на смес от TiO_2 , CeO_2 и ZnO . При същите условия са обработени механохимично по отделно TiO_2 , CeO_2 и ZnO . Средният размер на кристалитите при $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2\text{-ZnO}$ е в интервала 10-15 nm, а при механохимично третираните TiO_2 , CeO_2 , ZnO , той е 18-19 nm. Най-висока фотокаталитична способност към разграждане на Метил Оранж във воден разтвор под действието на УВ облъчване е показал механохимично обработеният ZnO (степен на разграждане 81 %) в сравнение с другите механохимично обработени материали. В присъствие на $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2\text{-ZnO}$ е установена степен на разграждане на Метил Оранж - 63 %. Най-висок адсорбционен капацитет след 30 минути тъмен период притежава нанокompозитния прах $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2\text{-ZnO}$ (0.263 mg/g).

Изследванията на д-р Захариева, описани в публикациите по показател „Г (т. 7)“ също са свързани със синтеза и охарактеризирането на наноразмерни материали. По своята същност те са експериментални, наситени са с детайли и представят огромен брой резултати по темата, в която кандидатката има най-висока квалификация и опит, а именно - оптимизиране на условията на синтез и получаването на различни по състав, структура и свойства наноразмерни материали, повечето на базата на метални оксиди и композити с каталитично практическо приложение.

Научните приноси на д-р Захариева в тези изследвания са представени накратко по-долу, в рамките на дефинираните от нея четири тематични групи.

- Проведени са изчерпателни фотокаталитични изследвания на $\text{NiO}_{0.8}\text{ZnO}_{0.2}/\text{ZnO}$, калциев титанат, дотиран с фосфор TiO_2 , абиотичен, биогенен материал, лепидокрокит и хибридни нанокомпозити (полибензимидазол- ZnO , полидифенилацетилен- ZnO в полистиренова матрица и ZnO /полистирен).
- Получени са ценни резултати при изучаването на механохимичната активация на цинков оксид без- и дотиран с Ag, Ni или Co, калциев титанат и материали от магнетитов тип. Установено е влиянието на параметрите на процеса на смилане върху фотокаталитичната активност на ZnO относно разграждането на ацетаминофен и хлорамфеникол.
- Доказан е фазовият състав и структурата на материали с фотокаталитични и други свойства.
- Натрупани са много данни относно условията за синтеза на феритни каталитични наноматериали, наноразмерни железни оксихидроксици и композитни фотокатализатори на основата на никелов оксид и цинков оксид.

Проведените от д-р Захариева научни изследвания се отличават с дълбочина и прецизност и са довели до натрупването на голям брой стойностни научни резултати и изводи с фундаментален характер. Следва да се отбележи, че разработването и оптимизирането на нови методи за синтез не е тривиална, а изключително комплексна и отнемаща много време процедура, изискваща широки и специфични познания, находчивост и много прецизна експериментална работа, която д-р Захариева успешно е довела до край в процеса на своите научни изследвания. По тази причина, нейните научни приноси не се ограничават само до синтезирането и доказването на неизвестни до сега съединения и данни за техните приложни свойства, те имат и методологичен характер. В хода на проведените изследвания, кандидатката е натрупала ценен опит, който ще бъде много полезна основа при нейните бъдещи изследвания по темата. Към бъдещите ѝ изследвания по темата имам следните препоръки.

1. В състава на повечето изследвани системи присъстват преходни метали, Zn, Ni, Co, Cu, Mn, Fe, с различна електронна конфигурация (d^0 , d^1 , d^2 , d^5 , d^3) и възможност за

променлива степен на окисление. При дискусията на резултатите, заслужава да се обърне повече внимание на зависимостта на (локалната)структурата и физикохимичните свойства на изследваните материали от електронната структура и степента на окисление на металния йон. За целта могат да се приложат и други експериментални техники и така да се разширят изследванията по темата.

2. Желателно е кандидатката да направи усилие в бъдеще да публикува резултатите от изследванията си в престижни международни списания с висок импакт фактор и квантил (Q1, Q2), където ще получи и ценни препоръки и идеи за своята изследователска работа.
3. Препоръчително е в една статия да се докладват възможно всички налични резултати относно синтеза, структурата и охарактеризирането, също така и зависимостите на приложните свойства на системите от тези параметри. Такива научни статии имат по-голям шанс да попаднат в реномирани списания и изследванията да получат широк кръг читатели и цитирания. Включването на данни за едни и същи обекти в серия различни публикации, създава впечатление за разкъсаност на изследванията.

Заклучение. В конкурса за заемане на АД „доцент“, д-р Катерина Захариева е представила достатъчен брой научни трудове, публикувани след защитата на ОНС „доктор“ и заемането на АД „главен асистент“. Постигнатите от кандидатката резултати в научно-изследователската дейност, напълно съответстват на ЗРАСРБ и специфичните изисквания на БАН и ИМК за неговото приложение. Д-р Захариева е успешен изследовател, който притежава безспорна научна квалификация и потенциал за ръководене на научни изследвания, свързани с оптимизиране на условията за синтез на нови материали с подобрени характеристики. След анализа на представените в конкурса материали, намирам за основателно да дам своята положителна оценка като гласувам с „да“ за избора на д-р Катерина Любомирова Захариева на академичната длъжност „доцент“ в ИМК при БАН по професионално направление 4.2. „Химически науки“, научна специалност „Химия на твърдото тяло, наноразмерни материали и минерали“.

София, 04.04.2021 г.

Рецензент:

(Наташа Трендафилова, проф. д-р ИОНХ-БАН)