

СТАНОВИЩЕ

от д-р Ления-Незае де Брито Гонсалвеш

доцент в Бургаски държавен университет „Проф. д-р Асен Златаров“,
по област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика
ПН 4.2. Химически науки, научна специалност Аналитична химия

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен „доктор“

по: област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика
професионално направление 4.2. Химически науки.
докторска програма Неорганична химия

Кандидат: Георги Василев Русев

Тема: Синтез, структура и свойства на оксотелурати(IV, VI) на елементи от IVБ група

Научен ръководител: доц. д-р Светлана Желева, БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“

1. Общо представяне на процедурата

Със Заповед № УД -235/30.06.2025 г. на Ректора на БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“ съм определена за член на научното жури за осигуряване на процедура за защита на дисертационен труд на тема „Синтез, структура и свойства на оксотелурати(IV, VI) на елементи от IVБ група“ за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма Неорганична химия. Автор на дисертационния труд е Георги Василев Русев, докторант в редовна форма на обучение към катедра „Химия“ към Факултет по природни науки (ФПН), БДУ с научен ръководител доц. д-р Светлана Желева от БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“.

Представеният от докторанта комплект материали на хартиен носител е в съответствие с Чл. 43.(3) от Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“, включва всички необходими документи.

2. Кратки автобиографични данни

Докторантът започва образованието си през 2011 г. в БДУ, специалност „Органични химични технологии“, където през 2016 г. придобива образователно-квалификационна степен „бакалавър“ с професионална квалификация „инженер-химик“. В периода 2017–2019 г. продължава обучението си в магистърска програма „Компютърни системи и технологии“, завършвайки с квалификация „магистър инженер“. Впоследствие, в периода 2019–2021 г., преминава обучение в магистърска програма „Информатика и информационни технологии в химията и химичното образование“. През 2021 г. зачислява в редовна докторантура по „Неорганична химия“ и през септември 2024 г. е отчислен с право на защита. От януари 2025 г. заема длъжността асистент в Катедра „Химия“, ФПН при БДУ.

3. Актуалност на тематиката

Актуалността на дисертационния труд се обуславя от оскъдните данни в литературата за структурата, термичната стабилност и каталитичните свойства на оксотелуратите на титан, цирконий и хафний, съчетани с нарастващия интерес към приложението на тези съединения в катализата, сензорните технологии и устойчивите материали. Значимостта на изследването е свързана с получаването и детайлното охарактеризиране на нови циркониеви и хафниеви оксотелурати, като чрез широк спектър от физикохимични методи и квантовохимичен анализ е изяснена до голяма степен тяхната структура, морфология и механизми на разлагане. Тези постижения имат фундаментален принос за разширяване на знанията в областта на неорганичната химия и материалознанието. Приложимостта е доказана чрез установената каталитична активност на някои от синтезираните съединения в естерификационни процеси и демонстрираната им термична устойчивост, които ги очертават като перспективни хетерогенни катализатори. Постигнатите резултати създават основа за рационален дизайн на нови функционални материали с потенциал за приложение в катализата и разработването на химични и биосензори.

4. Характеристика и оценка на дисертационния труд

Представеният дисертационен труд напълно отговаря на изискванията на ППЗРАСРБ и е структуриран в класически академичен формат. Общият му обем е 159 стандартни страници и включва Въведение с формулирани цели и задачи, Литературен обзор, Експериментална част, Резултати и обсъждане, Изводи, Научни приноси и Литература, както и пет страници Приложения. По номерация в текста са обозначени 76 фигури, 18 таблици и 18 уравнения, като в приложението са представени допълнително още 6 фигури. Следва да се отбележи, че в номерацията на илюстративния материал и уравненията се срещат технически несъответствия: липсват фигури с номера 44 и 54, има две фигури с номер 62, както и дублиране при таблици с номера 12, 14 и 17. Номерацията на уравненията също е некоректна – последователна до номер 10, след което отново започва от 8. Въпреки тези технически грешки, които не засягат съдържателната страна на труда, структурата и оформлението като цяло са коректни и прегледни. Използваната библиография обхваща 257 литературни източника, публикувани основно след 2000 година, което гарантира актуалност, съвременност и стабилност на научния апарат.

Въведението на дисертационния труд представя кратък обзор върху телура и неговите съединения, като подчертава уникалните структурни и химични особености на елемента и богатото разнообразие от формиране на оксотелурати. Особено внимание е отделено на факторите, определящи техните свойства, както и на аналогии със силикатната кристалохимия, което демонстрира широката научна перспектива. В същото време ясно са очертани и потенциалните приложения на оксотелуратите в ключови високотехнологични направления – оптоелектроника, фотоника, енергетика и катализа – което утвърждава актуалността и значимостта на изследването. На базата на този преглед са дефинирани целта и конкретните задачи на дисертационното изследване. Те са формулирани ясно и систематично – от хидротермалния синтез на нови оксотелурати, през тяхното структурно, спектрално и теоретично охарактеризиране, до изследването на термичната стабилност и каталитичната активност. Тази структура демонстрира логическа последователност и адекватна научна обосновааност.

Литературният обзор е добре структуриран и съдържа богата информация за кристалохимията, синтеза и свойствата на оксотелуратите (IV, VI). Текстът предлага задълбочено представяне на структурните единици и тяхното разнообразие, включително особеностите на Te(IV) и Te(VI) в различни координационни среди, както и начините на тяхното свързване в по-сложни структури. Важен принос на раздела е изчерпателното описание на методите за синтез, както и подчертаването на техния потенциал за получаване на нови материали. Обзорът демонстрира връзки между структура и свойства, илюстрирайки ги с примери за оптични, термични и електронни характеристики, и предлага сравнителни анализи с близки системи като оксоарсенати и оксоселенати. Наред с тези силни страни, текстът откроява и области, в които изследванията остават ограничени или липсват, което подсилва значимостта на избраната тема. От представения обзор може да се заключи, че областите, свързани със системите на Te(IV), както и с d- и f-елементи, остават по-слабо проучени – липсват систематични данни за стабилността на Te(IV) съединенията, за синтеза и структурата на повечето d-елементни телурати, както и достатъчно сведения за структурната химия и функционалните свойства на f-елементните системи.

Експерименталната част на дисертационния труд, разгърната в обем от 11 страници, представя условията за хидротермален синтез на оксотелурати (IV, VI) на Ti, Zr и Hf, както и използваните теоретични и експериментални методи за тяхното изследване. Включени са квантовохимични подходи като анализ на граничните молекулни орбитали и повърхността на Хиршфелд, наред с широк спектър от физикохимични методи: рентгенографски анализи (прахова и кристална дифракция), инфрачервена спектроскопия (FTIR), рентгенова фотоелектронна спектроскопия (XPS), сканираща електронна микроскопия (SEM), ултравиолетова спектроскопия (UV-Vis) и термичен анализ (TG/DTA, TG/DSC). Подробно е представен математичният апарат за изучаване на кинетиката на разлагане при неизотермно нагряване, включващ уравненията, свързващи активиращата енергия (E_a), предекспоненциалния множител (A) в уравнението на Арениус и скоростната константа (k), както и зависимостите между термодинамичните функции – енергия на Гибс, енталпия и ентропия – при образуването на активния комплекс. Накрая е описана експерименталната постановка за изследване на каталитичната активност чрез моделни реакции, в които получените оксотелурати са използвани като хетерогенни катализатори.

Глава „Резултати и дискусия“ се отличава с последователност, задълбоченост и широта на изследователския подход. Докторантът показва, че при хидротермалния синтез на титаниеви оксотелурати (IV, VI) получените твърди фази са аморфни и че въпреки вариациите в температурата не се достига кристална структура – факт, който е разгледан аргументирано като отправна точка за сравнение с циркониевите и хафниевите съединения. Така се демонстрира критичност и умение да се аргументира значимостта на отрицателните резултати. При циркониевите системи е постигнат важен резултат – синтез и рентгеноструктурно охарактеризиране на нова кристална фаза ($ZrTe_2O_6Cl$), докато при хафниевите аналози е отчетена трудността да се получи добре индексирана решетка поради високата термична стабилност на HfO_2 – наблюдение, поставено в контекста на литературни данни и свидетелстващо за научна зрялост.

Силна страна на тази глава е богатият аналитичен апарат: XRD, FTIR, Раман, XPS, SEM и UV-Vis спектроскопии са използвани не формално, а за потвърждаване на фазите и извеждане на закономерности в строежа. Приложен е интегриран подход, който е особено убедителен, защото осигурява едновременно експериментална и теоретична валидност на

результатите. Още по-значимо е прилагането на термичен анализ (TG/DTA, DSC), съчетано с кинетични модели (Coats–Redfern, Kissinger–Akahira–Sunose, Vyazovkin), чрез които са определени не само температурните диапазони на разлагане, но и конкретни параметри като енергия на активация и предекспоненциален фактор. Особено ценен принос представлява за първи път предложеното описание на механизми на термична деструкция, което свързва структурните особености с реалната стабилност и реактивоспособност на материалите. Високата активационна енергия за Hf-оксотелурат(IV) и отчетената отрицателна ентропия подчертават стабилността и сложността на кристалната структура – резултат с осезаема приносна стойност.

Допълнителна тежест придават и каталитичните експерименти: синтезираните Zr- и Hf-оксотелурати за първи път са изследвани като хетерогенни катализатори в реакцията на естерификация за получаване на бутилацетат. Макар и резултатите да са в начален етап, установената каталитична активност и перспективата за тяхното развитие като киселинни катализатори в контекста на „зелена химия“ и устойчиви технологии, подчертават приложния потенциал на изследването.

В обобщение, глава „Резултати и дискусия“ е написана с научна прецизност и убедителност, умело съчетаваща положителни и отрицателни резултати, експериментални и теоретични подходи, фундаментални и приложни измерения. Тя не само отговаря напълно на изискванията за дисертационен труд, но и ги надгражда чрез представяне на нови структурни данни, надежден кинетичен и термодинамичен анализ и първи стъпки в приложната насоченост на тези съединения.

В края на дисертационния труд са формулирани научните и научно-приложните приноси на изследването, които се отличават с оригиналност и новост. За първи път са синтезирани и подробно охарактеризирани нови фази на циркониеви и хафниеви оксотелурати(IV, VI), като чрез съчетаване на експериментални и квантовохимични методи е постигнато задълбочено разбиране на тяхната координационна среда, морфология и електронни особености. Определянето на кинетични и термодинамични параметри на разлагане допринася за по-добро изясняване на стабилността и реактивоспособността на тези материали и обогатява познанията в областта на кристалохимията. В приложен аспект, доказаната каталитична активност на циркониеви и хафниеви хидрогентелурати в естерификационни процеси, в съчетание с тяхната добра термична стабилност, очертава перспективата им като ефективни хетерогенни катализатори за високотемпературни процеси. Установената връзка между структура и каталитична активност създава основа за рационален дизайн на нови функционални оксидни катализатори, а потенциалът за приложение в сензорни технологии разширява практическите измерения на изследването. Представените приноси са ясен показател за високата научна и приложна стойност на дисертацията.

5. Преценка на публикациите и личния принос на докторанта

Изискуемите показатели на кандидата, съгласно ЗРАСРБ и чл. 43, ал.3 от Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в БДУ "Проф. д-р Асен Златаров" са следните:

Група показатели А

показател **A1 Дисертационен труд за ОНС „доктор“** – подготвена дисертация на тема „Експериментални и теоретични изследвания на селенатни системи“ по професионално направление 4.2 Химически науки – **50 точки**;

Група показатели Г

показател **G7 Научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science и Scopus), извън хабилитационния труд** – приложени са 2 бр. публикации с квартил **Q3**, т.е. **30 точки**:

- Tankov I., Rusev G., Yankova R., Georgieva V., Kolev H., Genieva S. Zirconyl and hafnium hydrogen tellurates as catalysts for esterification (2024) Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis, 137 (4), pp. 2105–2131, DOI: 10.1007/s11144-024-02655-5;
- Rusev G., Georgieva V., Genieva S., Tankov I. Non-Isothermal Decomposition Kinetics of Hafnium and Zirconyl Hydrogentellurates (2025) International Journal of Chemical Kinetics (ISSN 0538-8066, EISSN 1097-4601), 57 (4), pp. 254–262, DOI: 10.1002/kin.21773.

Общо за всички групи показатели 80 точки

От представената справка е видно, че кандидатът отговаря на минималните национални изисквания по ЗРАСРБ и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“. Относно личния принос на кандидата може да се съди по позицията му в авторския колектив на представените публикации – във първата статия е на втора позиция, а във втората – на първа. Освен двете посочени публикации в справката, кандидатът има отпечатана още една статия по темата на дисертацията в списание с импакт фактор, което допълнително затвърждава научната му активност.

6. Автореферат

Авторефератът на Георги Русев като цяло коректно отразява основните резултати и приносите от дисертацията. Ключовите нови съединения, методите за тяхното структурно охарактеризиране и изчислените кинетични и термодинамични параметри са представени ясно и стегнато. Резултатите за каталитичната активност са резюмирани с конкретни стойности за добивите и скоростните константи, което подсилва убедителността. Авторефератът представя синтезирано и коректно основните постижения и приноси, като същевременно поддържа академичен стил и аргументация.

7. Критични бележки и препоръки

Дисертационният труд е написан на добър научен език. Фигурите и таблиците са оформени акуратно и съдържат ясно поднесена информация, която позволява бързо и коректно разчитане на резултатите. Техническите несъответствия и печатните грешки са пренебрежимо малко; основно се отнасят до неточности в номерацията на таблици и фигури. На отделни места температурата е представена в градуси Целзий, докато в преобладаващата част от текста е използвана абсолютната термодинамична температура (Келвин), което нарушава последователността и единността на изложението. Тези бележки

обаче са от чисто технически характер и не засягат съдържанието и научната стойност на труда. Принципни възражения към представения материал нямам.

Заклучение

Познавам докторант Георги Русев още от времето на неговото обучение като студент в магистърска програма „Информатика и информационни технологии в химията и химичното образование“ и имам преки наблюдения върху неговата целенасоченост, трудолюбие, отговорност и последователност в работата. Цялостното представяне и реализация на настоящото дисертационно изследване категорично затвърждават впечатлението за наличието на качества и умения, необходими за самостоятелно провеждане на научни изследвания.

В съответствие с приложените научни публикации, постигнатите резултати, прецизната им интерпретация и изведените научни и научно-приложни приноси давам положителна оценка на дисертационния труд на тема „Синтез, структура и свойства на оксетелурати(IV, VI) на елементи от IVB група“. Предлагам на почитаемото Научно жури да присъди образователната и научна степен „Доктор“ на инж. Георги Василев Русев в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2 Химически науки, научна специалност „Неорганична химия“.

19.08.2025 г.

Председател на научното жури:

(доц. д-р Ления Гонсалвеш)

Подпис задличен
Чл.2 от ЗЗЛД