

СТАНОВИЩЕ

От Даниела Георгиева Ковачева, професор д-р в ИОНХ-БАН
относно дисертационен труд за придобиване на образователната и научната степен
«доктор» по научната специалност 4.2 Химически науки (Неорганична химия)

Автор на дисертационния труд: Георги Василев Русев

Тема на дисертационния труд: “Синтез, структура и свойства на
Оксотелурати (IV, VI) на елементи от IVB група”

1. Удовлетворяване на минималните изисквания, съгласно Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в Бургаски Държавен Университет “Проф. Д-р Асен Златаров”.

Георги Русев придобива бакалавърска степен през 2016 г. от Университет “Проф. Д-р Асен Златаров”, Бургас, по специалност Органични Химични Технологии. През 2019 г. придобива магистърска степен по Компютърни системи и технологии, а през 2021 г. магистърска степен по Информатика и информационни технологии в химията и химичното образование от Университет “Проф. Д-р Асен Златаров”, Бургас. В периода февруари 2021-февруари 2024 г. е редовен докторант в Университет “Проф. Д-р Асен Златаров”, Бургас в направление 4.2. “Химически науки” - Неорганична химия. От представените документи е видно, че инж. Русев е положил успешно всички изпити, предвидени в докторската програма. По темата на дисертацията има три публикации и 4 участия на научни форуми. Представените документи показват, че са изпълнени всички изисквания на ЗРАС и Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в Университет “Проф. Д-р Асен Златаров”, Бургас.

2. Актуалност на темата на дисертационния труд.

Телуратите и телуритите, макар и по-слабо използвани от други метални соли, намират специализирано приложение в материалознанието и електрониката. Телуритовите стъкла са ценни оптични материали с високо пречупване и ниска фононна енергия, подходящи за влакнести и нелинейни оптики, ИЧ технологии и електрокерамики. Оксотелуратите (IV, VI) впечатляват с гъвкави кристални структури и свойства като фотопроводимост, пиезоелектричност и йонна проводимост, използвани в оптоелектроника, фотоника и катализа. Въпреки потенциала си, оксотелуратите на циркония и хафния са слабо проучени, особено по отношение на термична стабилност и каталитична активност. Това подчертава актуалността на темата на дисертационния труд.

3. Тип на изследванията.

Дисертационният труд е написан на 161 страници, съдържа 70 фигури и 18 таблици. Цитирани са 247 източника. Той следва традиционната схема на представяне на научните изследвания. Дисертацията съдържа уводна част, в която е обоснован изследователския интерес към телуритовите материали, които позволяват формулирането на целите и задачите на дисертационния труд. В литературен обзор върху 158 източника са разгледани подробно методите за получаване на телур-съдържащи материали, с особен акцент върху техните структурни особености. В

експерименталната част са описани синтетичните процедури и методи за физикохимично характеризирани на получените оксотелурати. Методите са адекватно подбрани и резултатите от направените анализи са обобщени критично с оглед изясняване на връзката синтез-структура-свойства. Особено внимание е отделено теоретичните подходи за предсказване и обяснение на свойствата на изследваните материали. Резултатите от направените изследвания са представени по начин в който всеки от методите дава принос към пълноценно характеризирани на структурата и свойствата на обектите, като цялостната характеристика се получава като комбинация от приносите на отделните методики. Изводите логично следват от представените данни.

4. Цели на изследванията и получени резултати.

Целите на дисертацията на инж. Георги Русев са получаване на нови титанови, циркониеви и хафниеви оксотелурати(IV,VI) и тяхното детайлно структурно и физикохимично характеризирани. Целите включват и изучаване на кинетиката на разлагане на оксотелуратите при неизотермни условия и изследване на тяхната каталитична активност. Считаю, че целите на дисертационния труд са ясно формулирани. Конкретните задачи за постигането им са подходящо подбрани като цялост овладяването от докторанта на редица експериментални методики за характеризирани на материали, а също така и на теоретични подходи за предсказване и оценка на свойства. Дисертационният труд представя синтеза и изследванията на нови циркониеви и хафниеви оксотелурати(IV,VI). Съединенията $ZrO(HTeO_4)_2 \cdot 4H_2O$ и $Hf(HTeO_4)_4 \cdot 8H_2O$ са синтезирани с висока фазова чистота и ясно дефинирани кристални структури, потвърдени чрез спектроскопски методи (FTIR, Раман). Теоретичният анализ разкрива разлики в електронната структура и реактивоспособността – циркониевото съединение показва по-изразена нуклеофилност, докато хафниевото – електрофилност. Изследвана е термичната стабилност на двете фази до $1000^\circ C$, като е установен механизъм на разлагане и определени кинетични параметри. Включени са и изследвания върху нови съединения: циркониев хлороксотелурат(IV) ($ZrTe_2O_6Cl$) и хафниев оксотелурат(IV) ($Hf_3Te_3O_{12} \cdot 1.5H_2O$), с доказана кристална структура и висока термична устойчивост до $1200^\circ C$. При хафниевия оксотелурат е установен сложен триетапен механизъм на разпад с висока енергия на активация и стабилна кристална решетка. За пръв път синтезираните хидрогентелурати са приложени като хетерогенни киселинни катализатори в реакции на естерификация. XPS анализ показва повърхностно обогатяване с $HTeO_4^-$ фрагменти, което обуславя каталитичната им активност. Изчислените термодинамични функции допълнително потвърждават стабилността и приложимостта на съединенията. Получените резултати демонстрират потенциала на новите материали за приложение в зелена химия и устойчиви технологии. Представените резултати показват, че задачите на дисертационния труд са проведени успешно и целите са изпълнени.

5. Приноси на дисертационния труд.

Приносите на дисертационния труд могат да се класифицират като научни с потенциал за практическо приложение в поне две области. Те се отнасят към получаване

на нови данни и разширяване на съществуващи знания за телуровите материали. За първи път са синтезирани оксотелурати(IV, VI) на цирконий и хафний със състави: $ZrO(HTeO_4)_2 \cdot 4H_2O$, $Hf(HTeO_4)_4 \cdot 8H_2O$, $ZrTe_2O_6Cl$ и $Hf_3Te_3O_{12} \cdot 1.5H_2O$. Чрез квантовохимични изчисления и разнообразни физикохимични методи е охарактеризирана тяхната структура и морфология. Изчислени са кинетични и термодинамични параметри на термично разлагане, даващи информация за тяхната стабилност и реактивност. Доказана е каталитична активност на циркониев и хафниев хидрогентелурат в естерификационни реакции, което демонстрира потенциала им като ефективни хетерогенни катализатори, устойчиви на високи температури. Очертана е зависимост между структурата и каталитичната активност, създавайки основа за рационален дизайн на нови оксидни катализатори. Представена е методологична рамка за приложение на метални оксотелурати(VI) в катализата и сензорни технологии. Дисертационният труд е изграден върху 3 научни труда (един от които е в списание с Q2 и два с Q3). По темата на дисертацията са представени 4 доклада на национални и международни научни мероприятия. Докторантът е първи автор в една от представените статии и втори и трети автор в другите две статии по дисертацията. По мое мнение активното участие на докторанта е в извършването на синтеза, в обработката и критичния анализ на резултатите от различните методи за характеризиране.

6. Забележки:

В дисертацията и автореферата се забелязват редица неточности особено в представянето на български на доста термини при описание на използваните методи. Това оставя впечатление за известна небрежност при оформянето на дисертацията. Представеният автореферат отразява точно и изчерпателно съдържанието на дисертационния труд, но ми се струва, че е твърде голям по обем.

7. Заключение.

Въз основа на направения анализ считам, че по обем на изследванията и постигнати резултати дисертационният труд отговаря напълно на изискванията на ЗРАС в РБ и Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в Университет "Проф. Д-р Асен Златаров", Бургас. Моята оценка за дисертацията е положителна. **Затова препоръчвам на уважаемото жури да присъди научната степен "доктор" по научната специалност 4.2 Химически науки (Неорганична химия) на инж. Георги Василев Русев.**

Дата 12.08.2025 г.

Подпис заличен
Чл.2 от ЗЗЛД

/подпис/