

РЕЦЕНЗИЯ

от

проф. д-р Стоян Иванов Каракашев

преподавател в Катедра „Химия“, Факултет по Природни Науки, Шуменски
Университет "Еп. К. Преславски", гр. Шумен

Член на научно жури, утвърдено със заповед № 583/19.12.2025 на Ректора на
Университет „Проф. д-р Асен Златаров“, Бургас.

на дисертационен труд на тема **“Структура и функционални свойства на оксоселенати (IV, VI)”** на проф. д-р Румяна Златинова Янкова-Аврамова за получаване на научната степен „доктор на науките“, в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление 4.2. Химически науки; научна специалност „Неорганична химия“. Комплектът документи и публикациите на проф. д-р Янкова отговарят на изискванията на ЗРАСРБ, правилника за прилагането му и правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в Университет "Проф. д-р Асен Златаров" – Бургас.

Рецензията ми ще бъде основана на следните научни критерии:

- 1) актуалност на темата на дисертационния труд;
- 2) научна рамка на изследването;
- 3) основни научни резултати;
- 4) принос на дисертационния труд в полето на неорганичната химия;
- 5) научно-метрични показатели;
- 6) цялостно качество на дисертацията с оглед убедително и адекватно представяне на дисертационния труд.

Бургаски държавен университет
„Проф. д-р Асен Златаров“
8010 Бургас, бул. „Проф. Якимов“ №1

Per. № 504 / 05. 02. 2026.

1. Актуалност на темата на дисертационния труд

Темата за структурата и функционалните свойства на оксоселенатите е изключително актуална в съвременната химия на твърдото тяло и материалознанието. Нейното значение произтича от уникалните кристалохимични характеристики на селена и потенциала за създаване на високотехнологични материали. Ето основните аспекти, които определят нейната съвременна значимост:

1. Стереохимична активност на свободната електронна двойка:

При селенатите(IV), известни още като селенити, Se^{4+} притежава несподелена електронна двойка ($4s^2$). Тази двойка е стереохимично активна и предизвиква силна асиметрия в кристалната решетка. Защо е важно: Тази асиметрия е „рецепта“ за създаване на материали без център на симетрия, които са критични за лазерните технологии. Това намира приложение за разработване на материали за нелинейна оптика (NLO), които могат да променят честотата на светлината.

2. Мултифункционални материали

Селенатите(VI) и оксоселенатите често се изследват в комбинация с преходни или редкоземни метали. Това позволява комбинирането на няколко физични свойства в едно вещество:

- Сегнетоелектричество и пироелектричество: Благодарение на полярните структури.
- Магнетизъм: Изследване на нискоизмерни магнитни системи (вериги, слоеве), където селенатните групи служат като „мостове“ между магнитните йони.

3. Екологичен аспект и геохимия

Разбирането на структурата на тези съединения е ключово за опазването на околната среда. Селенът е двулик елемент – есенциален микроелемент, но силно токсичен в по-високи концентрации.

- Подвижност в природата: Разтворимостта и миграцията на селена в почвите и водите зависят директно от това дали той е във форма на селенит (SeO_3^{2-}) или селенат (SeO_4^{2-}).
- Пречистване: Синтезът на нови оксоселенати помага за разработването на методи за имобилизиране на токсичен селен в стабилни кристални фази.

2. Научна рамка на изследването

С оглед голямата значимост на селеновите съединения в съвременното материалознание основна цел на този труд е синтеза на нови селенити и селенати, експериментално и теоретично изследване на тяхната кристална решетка и физични и химични свойства за да се намери тяхното евентуално приложение.

За постигането на поставената цел са формулирани следните основни задачи:

1. Синтезиране на оксоселенати (IV, VI);
2. Определяне на структурата на кристалната им решетка;
3. Изследване на техния УВ, ИЧ спектър и термична стабилност;
4. Квантовохимично изследване на новополучените оксоселенати с оглед пълното им охарактеризиране на молекулно ниво и намиране на връзка със строежа на кристалната решетка и нейните свойства;
5. Намиране на потенциални приложения на новополучените оксоселенати;

Тази научна рамка всъщност е стандартна за всяка новаторска научно-изследователска задача в материалознанието – синтез, доказване на молекулната структура, изследване структурата на кристалната решетка и нейните на химични и физични свойства, както и квантово-химично изследване на молекулата за по-добро разбиране на нейните свойства и връзка с макро-свойствата на веществото.

3. Основни научни резултати

1. Синтезирани са 14 оксоселената:

$\text{Sm}_2(\text{OH})_2(\text{SeO}_3)(\text{HSeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$, $[\text{Hf}(\text{SeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{Al}_2(\text{SeO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{Rb}_2\text{Co}(\text{SeO}_3)_2$, Ag_2SeO_4 , Rb_2SeO_4 , $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4]\text{SeO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Hf}(\text{SeO}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_4$, $\text{Rb}_2[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{SeO}_4)_2$, $\text{Cs}_2\text{Ni}(\text{SeO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Hf}(\text{SeO}_3)(\text{SeO}_4)(\text{H}_2\text{O})_4$, $\text{Na}_2\text{Fe}(\text{SeO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_2\text{Co}(\text{SeO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

От всички тези съединения подробно са изследвани 4:

$[\text{Hf}(\text{SeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{Al}_2(\text{SeO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{Sm}_2(\text{OH})_2(\text{SeO}_3)(\text{HSeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$ и $\text{Rb}_2\text{Co}(\text{SeO}_3)_2$ а два от тях за синтезирани за първи път – $[\text{Hf}(\text{SeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Sm}_2(\text{OH})_2(\text{SeO}_3)(\text{HSeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$;

2. Определени са атомните координати, симетрията на кристалната решетка, междуатомните разстояния и пространственото опаковане в кристалите на гореспоменатите съединения чрез рентгеноструктурен анализ;

3. Получение са ИЧ и УВ спектрите на гореспоменатите съединения. Установени са характерните вибрационни честоти в тях;

4. Изследвана е тяхната термична стабилност чрез термогравиметричен (TGA) и диференциално-сканиращ калориметричен (DSC) анализ. Те установиха специфична температура на дехидратация на всеки кристалохидрат и обща термична устойчивост до около 1100 K. Установен е механизма на термичното разлагане.

5. Проведено е всеобхватно квантовохимично изследване на оксоселенатите за по-добро разбиране на молекулните им свойства и тяхната реактивоспособност.

3. Принос на дисертационния труд в полето на неорганичната химия;

1. Синтез на нови селенитни съединения: $[\text{Hf}(\text{SeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Sm}_2(\text{OH})_2(\text{SeO}_3)(\text{HSeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$;

2. Определени са геометрични, електронни и термодинамични параметри, НОМО–LUMO енергии, електростатичен потенциал и хиперконюгативни взаимодействия между атомите, водещи до по-стабилни комплекси, чрез квантово-химични изчисления

3. За първи път са описани водородни връзки в самариевото съединение.
4. Установени са селенити с различна метална координация с характерната за всеки електронна структура и термична стабилност.
5. Открит е нов нелинейно-оптичен селенит – $\text{Rb}_2\text{Co}(\text{SeO}_3)_2$.
6. Въведена и валидирана е интерполационна схема на Нютон за изчисляване на стандартни енталпии на образуване на селенити с висока точност.

5. Научно-метрични показатели

Представените от проф. Янкова материали доказващи научните и заслуги съответстват напълно на изискванията на ЗРАСРБ и свързаните с него правилници на национално и университетско ниво. Декларираните точки по групи наукометрични показатели са:

Показатели А: Дисертационен труд за присъждане на ОНС "доктор" – 50 т.

Показатели Б: Дисертационен труд за присъждане на научна степен „доктор на науките” – 100 т.

Показатели Г: Научни публикации в издания реферирани в Scopus/Web of Science е представен списък от 20 публикации – 311 т.

От тях 4 са в квантил Q2, 13 в квантил Q3 и 3 в квантил Q4 и отговарят на официалните изисквания на документацията.

Показатели Д: Цитирания в научни издания в Scopus/Web of Science - 96 цитата – 192 т.

Показатели Е: Девет участия в национален научен или образователен проект, ръководител на 3 национални проекта, издадени 3 университетски учебни пособия – 168.4 т.

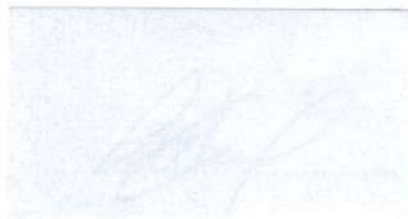
Сумарно, това прави 821.4 точки, което значително надхвърля националните минимални изисквания (350 т.), и университетските минимални изисквания на университет "Проф. д-р А. Златаров" (700 т.).

6. Цялостно качество на дисертацията с оглед убедително и адекватно представяне на дисертационния труд.

Дисертацията съдържа 391 страници, 75 таблици и 117 фигури. Библиографията включва 339 литературни източника. Литературната справка включва значителен литературен обзор върху квантовохимичните методи за изследване на молекули, спектроскопските характеристики на селенатите и свързаните с тях физични и химични свойства и много още информация относно връзката между молекулната структура и свойства на веществата. Всичко това говори за огромна теоретична подготовка на проф. Янкова и затова мога да кажа, че тя е експерт по неорганична химия. Дисертацията и авторефератът са изложени стройно и логически последователно. Както се казва – работено е професионално. Няма какво по вече да допълня.

С оглед на всичко това напълно подкрепям кандидатурата на проф. Янкова за заемане на научната степен „доктор на науките“ в професионално направление: 4.2. Химически науки, научна специалност: „Неорганична химия“.

04.02.2026 г.



/проф. д-р Стоян Каракашев/