

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за професор в професионално направление 4.2. Химически науки, за научна специалност „Физикохимия“ обявен в ДВ в брой № 20 от дата 10.03.2020 год. с кандидат доц. д-р Богдан Ставрев Рангелов

Рецензент: доц. д-р Драгомир Младенов Тачев

1. Общи положения и кратки биографични данни за кандидата.

Лабораторията по „Електронна микроскопия и микроанализ“ на ИФХ, БАН е основен елемент от структурата на Институт по физикохимия и участва при осъществяване на научно-изследователската дейност по почти всички научни задачи и тематични направления. Тя винаги е била тясно свързана с изучаването на процесите на зародишообразуване и растеж на метални и сплавни кристали върху разнообразни носещи подложки, епитаксиален растеж на полупроводници, морфологична устойчивост на неорганични кристали и др., които са част от основната научна тематика на Института. Към тези тематика естествено гравитират научните интереси на кандидата, доц. д-р Богдан Рангелов, който е дългогодишен член на лабораторията, първо като нейн сътрудник, а в последствие и като ръководител.

Богдан Рангелов е завършил Софийска математическа гимназия, профил физика през 1988 година, след което постъпва във Физическия факултет на Софийски Университет „Св. Кл. Охридски“. От там завършва като магистър по физика през 1995 г. Трудовите му правоотношения с Институт по физикохимия започват през същата година. През 2009 г. получава образователната и научна степен „доктор“ с дисертация на тема „Нестабилност на вицинални кристални повърхности – групиране на стъпала“. От 2011 година Богдан Рангелов е доцент в ИФХ-БАН. От 2010 година е ръководител на Лаборатория по електронна микроскопия и микроанализ.

Доцент Рангелов е имал и възможността да получи международен опит при своята специализация в Университета Фридрих-Александър в Ерланген, Германия в периода 2000-2004 година, където се е занимавал с изследване на молекулни реакции на повърхността и каталитични свойства на кристални повърхности Pt(111) и Fe(100) с помощта на HREELS (High resolution electron energy loss spectroscopy) спектроскопия. В последствие той поддържа сътрудничества и осъществява по-краткосрочни посещения в Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille CINaM, Марсилия, Франция и Институт физики полупроводников СО-РАН 2010, Новосибирск, Русия, където изследва процесите на растеж върху кристална повърхност Si(111).

В базата данни „Scopus“ към днешна дата (28.08.2020) се откриват 42 статии на доц. Рангелов. Хирш индексът му е 8 без отчитане на самоцитиранията от всички съавтори. Доцент Рангелов е и съавтор на един патент за изобретение.

2. Описание на представените материали

За придобиването на длъжността „професор“ доц. Рангелов е представил общо 41 статии, като 23 от тях не са включени в дисертацията за получаване на образователната и научна степен „доктор“ и не са представяни за получаване на длъжността „доцент“. От всички представени статии 16 са в международни научни списания с ранг Q1, 10 – Q2, 9 – Q3, 2 – Q4, една работа е в списание без импакт фактор но с SJR, три статии са публикувани в пълен текст в сборници от конференции. От статиите неповтарящи представените за получаване на ОНС доктор и

длъжността „доцент“ 9 са в списания с ранг Q1, 7 – Q2, 5 – Q3, 1 – Q4 и една в списание без импакт фактор но с SJR. Пресмятането на точките според ранговете на списанията и разпределението дадено от кандидата в „Справка за изпълнение на минимални изисквания на Института по физикохимия „Акад. Р. Каишев“ – БАН“ е показано в Таблица 1.

В предоставената от кандидата „Справка за изпълнение на минимални изисквания на Института по физикохимия „Акад. Р. Каишев“ – БАН към научната дейност на кандидатите за заемане на академична длъжност „професор“ в Област 4. Природни науки, математика и информатика, 4.2. Химически науки“ са посочени 113 цитата, които носят 226 точки, при изискване от 120 точки. Справка в базата данни на Scopus към днешна дата (28.08.2020) показва наличието на 212 цитата (424 точки) без отчитане на самоцитиранията на кой да е от съавторите. Без поединична проверка на цитатите е ясно, че критерият от 120 точки по група показатели Д е преизпълнен.

Справка в системата SONIX за научно отчитане в БАН потвърждава представените от доц. Рангелов участия в научни и образователни проекти, които му носят 160 точки в група Е. Доц. Рангелов е бил и съръководител на успешно защитила докторантка, Александра Стефанова Камушева, от което получава допълнителни 25 точки,

Таблица 1 показва съответствието на постигнатите от доц. Рангелов точки на минималните национални изисквания, изискванията на БАН, както и на изискванията, определени от Научния съвет на ИФХ съгласно Приложение № 1 от Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в Институт по физикохимия “Акад. Р. Каишев” към Българска академия на науките. Вижда се, че доц. Богдан Рангелов надхвърля както националните, така и изискванията на БАН и ИФХ-БАН за заемане на академичната длъжност „професор“. Количествените показатели на критериите за заемане на академичната длъжност са спазени.

Таблица 1 Постигнати от доц. Б. Рангелов точки в сравнение с националните изисквания, изискванията на БАН и Институт по физикохимия на БАН

Група показатели	Национални изисквания	Изисквания на БАН	Изисквания на ИФХ-БАН	Постигнати точки
А	50	50	50	50
Б	-	-	-	-
В	100	100	100	160
Г	200	220	220	302
Д	100	120	120	226
Е	150	150	150	185

Всички представени трудове имат отношение към конкурса. В рецензията ще бъдат отразени най-важните от тях, в които доц. Рангелов има най-съществен принос.

3. Обща характеристика на научно-изследователската и научноприложната дейност на кандидата.

Най-съществените работи на научно-изследователската дейност на Доц. Рангелов съчетават симулационни и теоретични изследвания [5, 6, 7, 8, 9, 10, 12,18, 23,24, 29, 38] с електронно-микроскопски наблюдения на процеси на фазообразуване в кондензирана материя. Работено е изключително върху вицинална кристална повърхност. Изследванията носят фундаментален характер, тъй като разглеждат фазообразуването на ниво присъединяване и отделяне на отделни атоми – метод представящ най-добрите постижения на българската физикохимична школа. От друга страна, микроскопските наблюдения са извършвани върху вицинална повърхност Si(111).

Силицият е все още най-използваният материал в микроелектрониката, поради което познанията за растежа и епитаксията върху силициев кристал имат съществено приложно значение. Наблюдава се и преминаване към Монте Карло симулационни изследвания, както на вицинални повърхности [9, 23, 24, 38], така и на метални нановерижки [28, 35] и на моделни системи от два вида частици [39, 19].

Втората съществена част от представените от доц. Рангелов трудове представлява един широкоспектърен букет от научни тематики, в които кандидатът съвсем успешно се вписва с добре очертан принос. Това са областите, стъкло и стъкло-кристални материали [14, 15, 17, 25, 30, 32, 36, 40], мека кондензирана материя [22, 37], тънки филми и катализатори. [1, 2, 3, 11, 13, 21, 26, 31, 33, 34, 41], като обединяващият фактор отново са електронно-микроскопски изследвания на процеси на фазообразуване и охарактеризиране. Това показва доц. Рангелов като изграден специалист, който владее до съвършенство методиката си и спокойно може да я прилага в различни области.

4. Основни научни и научно-приложни приноси.

Като изключително добро постижение бих посочил теоретичната обосновка за наличие на нестабилност върху вицинална кристална повърхност под формата на вълни на плътността на стъпалата [7, 8, 10] и последвалото експериментално развитие [16,20,27] и потвърждение [29]. Следва да се отбележи, че четирите най-съществени статии доц. Рангелов е първи автор, което несъмнено говори за основен принос в изследването.

В основата на изследването лежи намирането на нестационарно решение на уравненията за движение на стъпала на $(1+1)D$ вицинална кристална повърхност, за разлика от използваните до момента квазистационарни решения. Теоретичните разглеждания [7, 8, 10] решават въпроса за кристален растеж на вицинална повърхност, ако скоростта на движение на стъпалата е толкова висока, че не може да „осигури“ условията за стационарност – т.е. стойността на адатомната концентрация върху дадена тераса започва да зависи от времето а не само от координатата, както е в стационарното решение на дифузионното уравнение. Тъй като дифузионните уравнения са от втори род, е използвана предпоставката за кинетичен режим, при който има бърза дифузия по терасите и следователно концентрацията на адатомите по терасата е постоянна. Теоретичните и симулационни изследвания предсказват, че при определени условия в кинетичен режим на бърза дифузия на адатомите по повърхността и бавно присъединяване или откъсване към и от стъпалата растежа ще бъде нестабилен. Нестабилността се проявява като вълни на плътността на стъпалата. Друга нестабилност на растежа на вицинална повърхност е групирането на стъпалата – т.е. системата от еквиливантни тераси се разпада на групи от много широки и много тесни тераси. Показано е, че подобни нестабилности могат да възникнат и при липса на каквито и да е външни дестабилизиращи фактори, а само поради ефектите на нестационарност.

Статията [29], на която доц Рангелов също е първи автор, представлява обобщение на теоретичните открития и тяхното експериментално потвърждение чрез отражателна електронна микроскопия (reflection electron microscopy - REM). Основният принос тук е както в потвърждаването на теоретичните изследвания така и в намирането на експериментални условия за наблюдения на вълните на плътността на стъпалата в един сложен и комплексен експеримент по електронна микроскопия. Намирането на експериментални условия за наблюдаване и доказване на тази нова кинетична нестабилност изисква откриване на условия,

при които няма дестабилизиращи фактори и едновременно с това и използване на апаратурата за отражателна електронна микроскопия, която е единствената възможна за наблюдение на динамика на монотомни стъпала в условия на растеж или изпарение. Изследванията са проведени върху вицинална кристална повърхност Si(111), върху която традиционно са извършвани изследванията на доц. Рангелов. Посредством REM са проведени изследвания в подходящ температурен интервал и посока на правия ток, които показват началните етапи на формирането на вълни на плътността на стъпала в условия на растеж. Наблюдаваните вълни на плътността „съществуват“, докато може да се осигури съответната стойност на падащия поток осигуряващ надкритична стойност на движение на стъпалата, при която започват да се изявяват нестационарните ефекти.

Групирането на стъпала при нестационарно решение на модела на БКФ в кинетичен режим е изследвано в [7], като откритите условия при които имаме нестабилно решение на системата, е наречен „кинетичен ефект на паметта“ на ширините на терасите. Направен е линеен анализ на стабилността по метода на Фурие пертурбации на системата уравнения и са получени изрази за критичната скорост на движение на стъпалата над която системата от стъпала е нестабилна, т.е. малките отклонения от равновесните положения на стъпалата ще стават все по-големи. Численото интегриране на системата уравнения (при условия на нестабилност) показва, че по вициналната кристална повърхност ще се разпространяват вълни на компресия на плътността на стъпалата. Разглеждания модел е усложнен [8] чрез добавянето на електромиграционна сила – силата, която действа върху адатомите на повърхността на кристала, ако по кристала тече прав ток. Установено е, че при отчитане и влиянието на електромиграционна сила, системата може да бъде нестабилна както поради вече разглеждания кинетичен ефект на паметта на терасите, така и поради влиянието на електромиграцията. При посока на електромиграционната сила надолу по стъпалата и надкритична стойност се наблюдава класическото групиране на стъпала (bunching), докато при по-ниска стойност се наблюдават вълни на плътността както за случая на растеж, така и за случая на изпарение. Именно проблема с „отделянето“ на тези два дестабилизиращи фактора един от друг седи и в идеята за експерименталните изследвания в [29]. Степента на сложност на модела е увеличена чрез отчитане на влиянието на прозрачността на стъпалата – това означава, че скоростта на дадено стъпало в даден момент ще зависи от процеси случили се на съседни стъпала в предишни моменти [10]. Тази „нелокална“ динамика на стъпалата се изследва в [9] по метода Монте Карло. Установено е, че вициналаната стена с прозрачни стъпала е нестабилна, когато дрейфовата скорост на адатомите умножена по относителното изменение на адатомната концентрация спрямо равновесната е по-голяма от критичната скорост за движения на стъпалата. Получена е и зависимостта между броя тераси, които участват във вълната на нестабилност и относителната прозрачност на стъпалата.

Групирането на стъпала върху вицинална кристална повърхност е застъпено в още няколко работи на доц. Рангелов [5,12,18], като в една от тях той е първи автор. Те използват уравнения от типа БКФ, с включени или изключени различни моделни параметри, като целта е да се намерят условията за нестабилност, при които стъпалата биха се групирани. Получени са скейлинговите отношения между размера на групите стъпала, ширината на цялата група и времето. Моделите успяват да обяснят някои от характеристиките на значителното разнообразие от експериментално наблюдавано групиране на стъпала.

Работите [6, 9] се спират на въпроса за прехода от растеж чрез движение на стъпала към растеж чрез двумерно зародишообразуване по терасите при постоянна температура. Установено е, че този преход зависи от ширината на терасите на вициналната повърхност и е установена критична ширина, над която растежът преминава в режим на зародишообразуване. Получен е обобщен

израз за критичната ширина на терасата за растеж чрез движение на стъпала при отчитане на асиметрията на кинетичните коефициенти и прозрачни стъпала. Получена е Арениусова зависимост на намаляване на критичната ширина на терасата с намаляване на температурата, като самата зависимост представлява плавно преминаване между две прави с различни наклони, отговарящи на двата гранични случая на растеж – дифузионно и кинетично ограничен. Направена е и оценка кога влиянието на прозрачността на стъпалата е най-голяма – в среден температурен интервал между „чистите“ кинетичен и дифузионен режими.

Следващият цикъл работи със съществен научен принос касае хомоепитаксията върху вицинална кристална повърхност Si(111) [16, 20, 27], които ползват теоретичното разглеждане в [6, 9]. В последните две работи доц. Рангелов отново е първи автор. Основен предмет на изследванията е т.нар. критична ширина на терасата, при която се осъществява преход от растеж чрез движение на стъпала към растеж чрез двумерно зародишообразуване върху терасата. Установено е, че хомоепитаксиалния растеж е мултислоен, мултитародишен и се проявява като формиране на динамични пирамидални структури имащи пространствена и времева периодичност. Открита е стойност на температурата на повърхността от 720 °C, под която кристалния растеж се осъществява посредством кинетично ограничен режим на присъединяване на адатоми към стъпалата. Съответно, при температура над 720 °C растежа се осъществява чрез дифузионно ограничен режим. Определена е стойността на степения показател, който дава отношението между критичната ширина на терасата и стойността на падащия поток от адатоми, а от него е определена и големината на критичния зародиш, както и активиращите енергии за двумерно зародишообразуване в интервалите под и над 720 °C.

Посредством същите експериментални и теоретични подходи е изследвана и „прозрачността“ на стъпалата [27] на вицинална кристална повърхност и нейното влияние върху режимите на растеж на повърхността. В този случай като основа на повърхността са използвани Si(111) тераси с ширини от 1 до 100 микрометра, отделени една от друга чрез групирани монотомни стъпала.

Като резултат е показано, че в температурен интервал 600 – 750°C непрекъснатото двумерно зародишообразуване и последващ растеж води до образуване на удължени пирамидални хребети (при $T < 720$ °C) и до отделни пирамиди при $T = 750$ °C, като и едните и другите представляват проява на нестабилност при растежа. Установено е, че промяната на ширината на най-горната тераса на пирамидалните форми на растеж, както и увеличаването на броя слоеве, участващи в пирамидалните форми, са свързани с на размера на критичния зародиш и съответно с преимуществено наличие на поток от адатоми надолу по стъпалата при температура 650 °C. При температура над 720 °C обаче, се установява преимуществен поток от адатоми нагоре по стъпалата, поради по-високия бариер на Ерлих-Швьобел за вграждане в горно стоящо стъпало. По този начин в [27] са установени отношенията между условията на растеж, прозрачността на стъпалата на вициналната повърхност и морфологията на растежа.

Изследванията на растежа на вицинална кристална повърхност се допълва от Монте Карло симулации касаещи дифузията на адсорбирани атоми. Установено е, че при вариране на параметрите на модела като плътност на кинковете по стъпалата, или вероятността за дифузия по челото на стъпалата, във всички случаи, осреднено, един адатом посещава до 10 стъпала в околност на терасата, от която е започнал дифузията си след попадане от газова фаза [9]. Показано е, че съществува скейлингово отношение между средния брой прескоци осъществяван от адатом и средното разстояние между кинковете по стъпалата.

Експериментално е доказано, че за повърхността Si(111) съществуват три последователни температурни интервала, в които се редува групиране на стъпала със стабилен. В рамките на БКФ

модела това „превключване“ от стабилен към нестабилен и обратно към стабилен растеж може да се обясни само ако се допусне съществуването на явлениято прозрачност на стъпалата в средния температурен интервал. Монте Карло симулациите [23] предлагат нова хипотеза за обясняване на това явление. Симулациите на двумерен остров върху тераса с (111) ориентация отчетливо показват три режима на разпад на острова в зависимост от големината на приложена електромиграционна сила. Тези три режима заедно с прозрачността на стъпалата се свързват със сложното експериментално поведение на групирането на стъпала.

Изброените до тук научни приноси на доц. Рангелов касаят фундаментална научна област свързана с растежа на кристалите. Извършено е доразвиване на модела на Бъртън-Кабрера-Франк за нестационарния случай, което е довело до обогатяване на съществуващи знания и теории. Определени са условията и границите на различните режими на растеж на вицинална кристална повърхност, стационарен, т.е. с еквиливантни тераси, нестационарен – от тип групиране на стъпала или вълни на плътността на стъпалата или чрез двумерно зародишообразуване. Предсказан е и в последствие експериментално установен режима на вълни на плътността на стъпалата. Всички теоретични разработки са в тясна връзка с експерименти по електронна микроскопия, в която доц. Рангелов е специалист. В съществена част от публикациите доц. Рангелов е първи автор, което потвърждава съществения му личен принос.

Считам, че изложените до тук научни приноси са достатъчни за присъждане на кандидата на академичната длъжност професор по професионално направление 4.2. Химически науки, поради което няма да се спирам на приносите му в областта на Електронно-микроскопски изследвания на процеси на фазообразуване и охарактеризиране на стъкло и стъкло-кристални материали [14, 15, 17, 25, 30, 32, 36, 40], мека кондензирана материя [22, 37] и тънки филми и катализатори [1, 2, 3, 11, 13, 21, 26, 31, 33, 34, 41]. Те само показват широкообхватността на знанията и уменията на кандидата, което е съществен плюс при съвременната научна интердисциплинарност.

5. Отражение на научните публикации на кандидата в българската и чуждестранната литература.

В документацията кандидатът е представил 198 цитата. Справката в Скопус със днешна дата дава 212 цитата без самоцитатите на всички автори. Известно е, че Скопус и Web of Knowledge обикновено дават занижен брой цитати, като в частност изпускат цитатите от дисертации. Най-цитирани са приложните трудове на доц. Рангелов, в частност, свързаните с изследване на стъкло и стъкло-кристални материали с цел обезопасяване на индустриални отпадъци. Следват като цяло работите свързани с кристалния растеж на вицинална повърхност, като броя цитати варира между 3 и 16 цитата на статия. Най цитирана е статията [6] – 16 пъти. Може да се заключи, че трудовете на доц. Рангелов намират добро отражение в научната литература.

6. Критични бележки и препоръки към научните трудове на кандидата.

Актуализацията на основната тематика на кандидата може би протича сравнително бавно.

7. Лични впечатления на рецензента за кандидата.

Познавам кандидата от повече от 20 години и съм свидетел на неговото кариерно израстване, въпреки че не сме имали възможността да работим заедно по обща задача. Доц. Рангелов е старателен учен, с чувство към детайла и неговото изпипване. С времето той придоби и

международен опит, както като участник в изследвания, така и като учен, който може ясно и атрактивно да изложи научни резултати пред широка публика. Доц. Рангелов е колегиална, коректна и неконфликтна личност, ползваща се с доверие и авторитет сред колегите. Не на последно място, като ръководител на лабораторията по електронна микроскопия на ИФХ, доц. Рангелов натрупа и известен управленски и научно-организационен опит.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Според представените документи, единственият кандидат по обявения конкурс за професор в ИФХ-БАН, доцент д-р Богдан Ставрев Рангелов отговаря на изискванията за заемане на академичната длъжност професор по професионално направление 4.2. Химически науки, специалност „Физикохимия“, като удовлетворява и надхвърля изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за прилагането му в РБ и Правилника за прилагането му в ИФХ БАН. Приносите на кандидата са ясно различни и неоспорими. Анализът на цялостната му научно-изследователска работа и научно-организационна дейност, както и моите лични впечатления, ми дават основание да препоръчам на членовете на научното жури по провеждане на конкурса да подкрепят кандидатурата на доцент д-р Богдан Рангелов за да бъде избран на академичната длъжност “професор” за нуждите на Лаборатория „Електронна микроскопия и микроанализ“ при Институт по физикохимия на БАН.

Дата: 15.09.2020

Рецензент

/ доц. д-р Драгомир Тачев /