

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за заемане на академична длъжност „професор” в професионално направление 4.2 „Химически науки”, научна специалност „Физикохимия” за нуждите на Лаборатория „Електронна микроскопия и микроанализ”-ИФХ, БАН по тематика „Електронно-микроскопски и симулационни изследвания на процеси на фазообразуване в кондензирана материя”.

обявен в ДВ бр. 20 от 10.03.2020 г.

с кандидат **доц. д-р Богдан Ставрев Рангелов**

Рецензент: **проф. д-р Зара Петкова Черкезова-Желева**, Институт по катализ – БАН,
член на научното жури

1. Общи положения и кратки биографични данни за кандидата:

Настоящата рецензия е изготвена въз основа на Заповед № 57-РД-09 от 25.06.2020 г. на Директора на Институт по физикохимия "Акад. Р. Каишев" – БАН, издадена на основание на решение на НС на ИФХ-БАН, Протокол № 27-РД-18-03 от 24.06.2020 г. във връзка с избор на професор по обявен конкурс в ДВ бр. 20 от 10.03.2020 г. Единствен кандидат в конкурса за заемане на академичната длъжност „професор” е **доц. д-р Богдан Ставрев Рангелов** от лаборатория „Електронна микроскопия и микроанализ” - Институт по физикохимия „Акад. Р. Каишев” – БАН.

Доц. д-р Богдан Рангелов завършва средно образование през 1988г. в Софийска математическа гимназия, профил физика и висше образование през 1995г. във Физически факултет на Софийски университет „Св. Кл. Охридски”. През 2009 г. придобива образователна и научна степен "доктор" в Институт по физикохимия-БАН, по научна специалност „Физикохимия” с дисертация на тема: „Нестабилност на вичинални кристални повърхности – групиране на стъпала”, диплома №: 33602, присъдена му от Висшата атестационна комисия на 07.12.2009 г. През 2011 година д-р Богдан Рангелов е избран за доцент в ИФХ-БАН и към настоящия момент работи на тази длъжност като ръководител на Лаборатория по електронна микроскопия и микроанализ. Към 19.05.2020 г. има стаж по специалността, който е повече от изискуемия в нормативните документи за конкурса за заемане на академична длъжност „професор” в ИФХ-БАН. Значителен принос за научното му развитие имат реализираните от кандидата специализации за провеждане на изследвания във водещи научни центрове в чужбина:

- 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 и високовакуумна техника – Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Германия (2000-2004).

- Изследване на спирален растеж върху кристална повърхност Si(111), вълни на плътността на стъпалата с помощта на REM (reflection electron microscopy) и насочена дифузия на атомни клъстери под действие на външна сила с помощта на LEEM (Low energy electron microscopy) – Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille CINaM, Марсилия, Франция (3 месеца, 2005 и 2018).

- Изследване на процесите на епитаксиален послоен растеж върху кристална повърхност Si(111) с помощта на REM – Институт физики полупроводников СО-РАН, Новосибирск, Русия (2 седмици, 2010).

2. Описание на представените материали:

Представеният ми комплект материали на електронен и хартиен носител съдържа всички необходими документи, описани в Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИФХ. БАН. Доц. д-р Богдан Рангелов отговаря на посочените условия. За участие в конкурса той е приложил общо 41 научни труда, като 8 публикации са обособени като равностойни на хабилитационен труд, а други 15 оригинални научни труда покриват изискванията по настоящата процедура. Тези 23 научни труда не повтарят представените публикации за придобиване на онс „доктор” и за заемане на академична длъжност „доцент”. От представената в материалите справка за изпълнение на критериите по гл. II, чл. 2 и Приложение I на Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИФХ-БАН се вижда, че по всеки от показателите д-р Богдан Рангелов има необходимия брой точки, като по някои показатели (Д, В, Г и Е) този брой значително надхвърля минималните изисквания. **Кандидатът участва в конкурса с общо 923 точки, при необходимими 640 т.**

Общият брой публикации на д-р Богдан Рангелов, представени за участие в конкурса е 41 и те са публикувани в реферирани от Scopus/Web of Science издания. Не са установени данни за плагиатство за всички представени публикации. Кандидатът участва в конкурса с 23 публикации в научни списания, включени в базата данни на Scopus/Web of Science, като 9 от тях са от най-високата (Q1) категория.

Публикациите, участващи в конкурса, са разделени в две групи, покриващи показатели В и Г, съгласно Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИФХ – БАН. В първата група - показател В-4 „Хабилитационен труд - научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (WoS или Scopus)” са представени 8 публикации. По този показател изискуемите 100 т. са многократно надвишени с получените 160т. Две от тези статии са в списания в Q1 област (WoS или Scopus), 4 публикации са в списания в Q2 област, 2 са в списания в Q3 област. Трябва да се отбележи, че половината от тези публикации са реализирани в колектив с един съавтор, а в 5 от 8 кандидатът е първи автор, което показва водещия му принос в разработката на представените научни трудове и свързаните с тях приноси. Голяма част от научните изследвания д-р Рангелов е провел съвместно с водещи изследователи от чужбина. Във втората група са представени 15 статии, покриващи показател Г-7 и всички те са публикации в реферирани списания, респективно с Q1 (7 публикации), с Q2 (3 публикации), с Q3 (3 публикации), с Q4 (1 публикация) и със SJR без IF (1 публикация). Сумата от общо 302 точки в показател Г надвишава значително необходимите 220 точки. Авторитетните международни списания в област Q1, в които са публикувани голяма част от резултатите от научноизследователската дейност на д-р Рангелов са: Physical Review Letters, Surface Science, Ceramics International, ChemSusChem, Materials Letters, Journal of Non-Crystalline Solids, Journal of Environmental Chemical Engineering, Journal of the European Ceramic Society, International Journal of Hydrogen Energy и др.

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

Научно-изследователската и научноприложната дейност на д-р Богдан Рангелов са фокусирани върху актуална за европейските и националните приоритети тематика и нови предизвикателства в науката. Изследванията са свързани с научни и научно-приложни електронно-микроскопски изследвания на високо ниво, както и със симулации на процесите на фазообразуване в кондензирана материя. Научните

интереси на кандидата и владенето на съвременни изследователски и теоритични методи са фокусирани в изследване на елементарния механизъм на растеж на кристалите, динамика на формиране на атомни стъпала върху кристална повърхност, техния спирален растеж и разтваряне. Със своите изследвания д-р Рангелов е продължител на една от най-старите и водещи български школи в науката – школата на световно признатите учени Странски и Каишев. Фундаменталните и приложните изследвания, представени от кандидата включват и редица други изследвания, посветени на електронно-микроскопско характеризирание на електрохимично получени тънки слоеве и електроди, въглеродни наноматериали, нови и усъвършенствани синтеровани материали, получени от промишлени и битови отпадъци в съответствие с принципите на кръговата икономика и др.

Резултатите от научно-изследователската и научноприложната дейност на кандидата са представени в съавторство като устни и постерни доклади на над 40 международни и национални научни форуми. В документите по настоящия конкурс доц. Рангелов е представил списък с 10 избрани лично изнесени от него устни доклади на международни и национални научни форуми. Участието в престижни научни форуми и изнесените доклади безспорно имат значителен принос за научното развитие на кандидата, въпреки че нямат формално отражение в показателите за оценка по конкурса. Потвърждение за това е избора на д-р Б. Рангелов за представител на България и член на изпълнителния съвет в Европейската асоциация по кристален растеж като признат водещ учен в областта.

Научно-изследователската и научноприложната дейност на кандидата включва ръководство на международен научен проект ДНТС/01/15/Франция и участие в работния колектив на 11 международни и национални научни или образователни проекта, както и в два проекта по ЕБР. Представените в конкурса изследвания и доклади са тясно свързани с изпълнението на съответните проекти.

Преподавателската дейност и ръководството/участието на д-р Б. Рангелов в изпълнение на научни и образователни проекти му носят 185 т. по показател Е. Д-р Рангелов е съ-ръководител на един успешно защитил докторант. Освен това кандидатът е участник в проекти и е организатор и лектор в научни школи с основен фокус – обучение на докторанти и млади учени. Кандидатът не е приложил справка за привлечените средства (т. Е-18) във връзка с ръководената от него Лаборатория по електронна микроскопия и микроанализ на ИФХ-БАН, с което реалната оценка за дейността му по показател Е многократно би надвишила необходимите 150т. за длъжност „професор“.

Въз основа на постигнатите резултати от неговата научно-изследователска и научноприложна дейност, доц. д-р Рангелов е регистриран в НАЦИД (<https://nas.nacid.bg/dissertation-preview/28364>), където са му признати образователна и научна степен "доктор" и академичната длъжност „доцент“.

4. Оценка на научните и научно-приложните приноси на кандидата:

Научните и научноприложните приноси от разработките на доц. д-р Б. Рангелов могат да бъдат обобщени в следните **основни тематични направления**:

1. Електронно-микроскопски изследвания на процеси на фазообразуване в кондензирана материя (публикации № 1-4, 11, 13-17, 20-22, 25-27, 30-34, 36-37, 40-41)

2. Симулационни и теоретични изследвания на процеси на фазообразуване в кондензирана материя (публикации № 5-10, 12, 18-19, 23-24, 28-29, 35, 38-39)

Основната тематика и приносите на д-р Рангелов естествено надграждат, дообогатяват и развиват научните и научно-приложни приноси по проведените изследвания, представени за придобиване на онс „доктор“ и за заемане на академична

длъжност „доцент“. Цялостната творческа дейност на кандидата е фокусирана основно върху елементарните процеси, протичащи при растеж и разграждане на вицинални кристални повърхности. Такова изследване е от особена важност, т.к. всяка плътно опакована стена на реален кристал е практически вицинална и върху нея се формират множество стъпала с моноатомна височина. Тези моноатомни стъпала се движат и групират върху кристалната стена при растежа и разграждането на кристала, което обуславя постоянно изменяща се морфология на кристалната повърхност. Научните приноси на кандидата в тази област са безспорни. Те повишават познанието ни за ролята на различните фактори в сложните процеси на формиране на моноатомните стъпала върху кристалната повърхност. Изследвани са стабилизиращи и дестабилизиращи микроморфологията фактори, миграция на адатоми, тяхната дифузия и вграждането им в стъпалата, както и ефекта на „прозрачност“ на стъпалата и др. Важно е да се подчертае, че в тези изследвания доц. Рангелов умело съчетава и използва в синергия два много силни изследователски подхода. От една страна, това е теоретичното симулационно изследване и задълбочен математически анализ на моноатомните стъпала върху кристалната повърхност. От друга страна, получените теоретични данни са подкрепени с много добре планиран и проведен от него експеримент с модерна техника, която да онагледява динамиката на процесите.

В първото **основно тематично направление: електронно-микроскопски изследвания на процеси на фазиобразуване в кондензирана материя**, се включват електронно-микроскопски изследвания на процеси на двумерно зародишообразуване, кристален растеж и процеси на нестабилност върху вицинална кристална повърхност на Si(111) (публикации № 4, 16, 20, 27, 29). С помощта на модерна апаратура - отражателна електронна микроскопия (*in situ* reflection electron microscopy - REM) са получени важни експериментални резултати за двумерно зародишообразуване, мултислоен островен и спирален кристален растеж, както и критична ширина на терасите върху вицинална кристална повърхност Si(111). Използвана е модификация на положението на флуоресцентния екран на микроскопа (LODREM – low distortion reflection electron microscopy), като за първи път са получени неизкривени изображения на моноатомни спирали (с височина на стъпалото един решетъчен параметър) на растеж/изпарение върху вицинална кристална повърхност Si(111). В широк температурен интервал и с използване на максимално постижимите стойности за пресищане (подсищане) в апаратурата са изследвани процесите на кристален растеж (изпарение) посредством спирален механизъм. Направена е оценка на плътността на дислокационните източници, както и на броя ляво и дясно въртящи спирали, а формата на спиралите е определена като Архимедова. Потвърдено е припокриването на дифузионните полета на съседни стъпала поради големия свободен пробег на адатомите в съответния високотемпературен интервал, наличието на т.нар. back-stress ефект, а също и ефекта на „прозрачност“ на стъпалата на вициналната кристална повърхност по отношение на адатомите. Връзката между теоретичните (симулационни) изследвания [16, 20, 27] и експерименталните, проведени с помощта на REM [6, 9] показва детайли за хомоепитаксията върху вицинална кристална повърхност Si(111). В работи [10, 29] е намерено експериментално доказателство на теоретично/симулационно „предречената“ нов тип нестабилност по време на кристален растеж, т.нар. „вълни на плътността на стъпалата“. Основен предмет на изследване е ширината, при която става преход от растеж чрез движение на стъпала към растеж чрез двумерно зародишообразуване върху терасата, т.нар. „критична ширина на терасата“. Чрез вариране на температурата на повърхността и падащия поток от силициеви адатоми е установена температурата, под която кристалният растеж се осъществява посредством кинетично лимитирано присъединяване на адатоми към стъпалата

(attachment limited), а над тази стойност растежът се осъществява чрез дифузионно ограничен режим (diffusion limited). Определени са и други важни параметри, които позволяват пресмятане на големината на критичния зародиш и активиращите енергии за двумерно зародишообразуване. Морфологията на растящите двумерни острови е изследвана и с атомно силова микроскопия. Аналогично са получени данни за т.нар. „прозрачност“ на стъпалата. За целта са получени широки тераси (около 100 микрометра), което е сложна експериментална задача [27].

Експерименталното наблюдаване и доказване на вълни на плътността на стъпалата е сериозно научно предизвикателство, с което кандидатът се е справил успешно. То е свързано с намирането на условия, при които няма дестабилизиращи фактори и едновременно с това се използва REM апаратурата за наблюдение на динамика на монотомни стъпала в условия на растеж или изпарение. С помощта на REM е изследвана експериментално и „прозрачността“ на стъпалата по отношение на получените пирамидални структури и зависимостта на морфологията им от баланса на потоците от адатоми, които „прескачат“ стъпалата в посока „нагоре“ или „надолу“ [27].

Важна част от научноприложните приноси на кандидата е свързана с третирането на отпадъци от бита и използването им като суровина за получаване на синтеровани стъкло-кристални материали. По тази изключително актуална тема, свързана с опазване на околната среда и кръговата икономика, д-р Рангелов има получени важни за практиката резултати [14, 15, 17, 25, 30, 32, 36, 40]. При изследване получаването на стъклокерамики от имобилизиране на големи количества металургични отпадъци (основно железни оксиди) от производството на стомана и фероникел, е доказано образуването на кристализационно предизвикана поръзност при обемна кристализация [30, 36]. В друго изследване са измерени проводимостта и магнитните свойства на материали, получени чрез метода на т.нар. топене с лазер в транзитната зона – Laser Floating Zone [40].

Кандидатът има научен принос и в изследването на мека кондензирана материя [22, 37]. Регистрирани са адсорбирани слоеве от дву-антенни олигоглицини върху различни подложки и при различни концентрации, които показват формиране на широк набор от структури със специфична морфология (плътни или мрежовидни покрития, съставени от пръчковидни, издължени или плочковидни комплекси). Изследван е антибактериалният ефект по отношение на *E. coli* на йонно-обменен клиноптилолит с добавка от Ag и Cd. Поради експертните си познания по електронна микроскопия, д-р Рангелов участва и в екипи по подготовката на експеримента, изследване на структурата и морфологията на тънки филми и катализатори [1, 2, 3, 11, 13, 21, 26, 31, 33, 34, 41].

По второто **основно тематично направление: Симулационни и теоретични изследвания на процеси на фазообразуване в кондензирана материя**, кандидатът също има значителни научни приноси. Теоретично (със симулации) е развита идеята за нестабилност на кристален растеж на вицинална кристална повърхност от поява на вълни на плътността на стъпалата и е получено експериментално доказателство за това [7, 8, 10, 29]. Моделиране на способността на стъпалата да „приемат“ („отдават“) адатоми в процеса на кристален растеж (изпарение) е важно за определяне на морфологията на кристалната повърхност. В работа [7] е установен „кинетичен ефект на паметга“ на ширините на терасите и с линеен анализ на стабилността на системата уравнения са получени изрази за критичната скорост на движение на стъпалата, над която системата е нестабилна. В [8], моделът е усложнен чрез добавянето на т.нар. електромиграционна сила. При отчитане на влиянието на прозрачността на стъпалата, скоростта на дадено стъпало в даден момент зависи от процеси (прескоци), случили се на „по-отдалечени стъпала“ в предходни моменти [10]. Това е т.нар. „нелокална“

динамика на стъпалата, която е изследвана по метода Монте Карло [9]. Получена е и зависимостта между броя тераси, които участват във вълната на нестабилност и относителната прозрачност на стъпалата. Групиране на стъпала върху вицинална кристална повърхност е проследено в [5, 12, 18]. Изследвано е влиянието на прозрачността на стъпалата върху критичната ширина на терасата на вицинална кристална повърхност за преход от растеж чрез движение на стъпала към двумерно зародишообразуване [6]. Направена е оценка за максималното влияние на прозрачността на стъпалата в среден температурен интервал между кинетичен и дифузионен режим [20]). С Монте Карло симулации са изследвани процеси на дифузия на адатоми и атомни кълъстери върху вицинални кристални повърхности, както и свързани с тях явления, като прозрачност на стъпала и промяна на формата на кълъстерите под действието на електромиграционна сила [9, 23, 24, 38]. Основен резултат тук е, че при вариране на параметрите на модела като плътност на кинковите по стъпалата или вероятност за дифузия по челото на стъпалата, адатом посещава среднено до 10 стъпала в околност на терасата, от която е започнал дифузията си. Показано е, че дори много малка стойност на електромиграционната сила има значителен ефект върху траекторията на адатомна дифузия. В работи [23] и [24] е изследвана дифузията на адатоми върху моделна тераса с ориентация (111), с използване на т.нар. tight-binding потенциал и Метрополис Монте Карло алгоритъм. Предложен е обобщен модел за обяснение на сложното поведение на явленията групиране на стъпала върху повърхност fcc(111), в зависимост от посоката на електромиграционната сила и температурата. Предложен е механизъм, който може да обясни защо стъпалата могат да „превключват“ последователно между режим на непрозрачност и прозрачност. Описаният модел показва връзката между температура, заграпяване на стъпалата, външна действаща сила и отношението им към явленията прозрачност на стъпалата. В [38] се изследва насочената дифузия на двумерни острови и ваканционни кълъстери върху стена (111), в следствие на насоченото действие на външната сила, като се използва кинетичен Монте Карло модел.

Проведени са Монте Карло симулации на термичната стабилност на свободно стоящи в пространството моноатомни метални верижки [28] и на двумерни хомоепитаксиални верижки върху повърхност fcc(111) [35], като е използван tight-binding потенциал с параметри за мед и Метрополис Монте Карло алгоритъм. Проведени са Монте Карло симулационни изследвания на частици с анизотропни взаимодействия и разширен модел на дифузионно контролиран растеж в система с два типа частици [39, 19]. Новост в работа [19] е въвеждането на т.нар. коефициент на присъединяване към растящия двумерен кълъстер, за разлика от оригиналния модел на Уитън и Сандер за дифузионно контролираната агрегация. Това позволява в симулациите процесът да се отмества от дифузионно към кинетично контролиран. Изчислени са фракталните размерности на кълъстерите в зависимост от коефициента на присъединяване и е показана промяната в плътността на агрегатите. Публикация [39] включва най-новите симулационни изследвания на кандидата изследващи мека кондензирана материя и взаимодействия между моделни молекулни комплекси, които не са пространствено симетрични, а насочени – т.нар. модел на патчи (patchy) частици. Направен е детайлен анализ на кинетиката на образуване на възможните фази, както и на елементарните процеси на изграждане на фазите, влиянието на температурата и анизотропността на взаимодействията. Тези изследвания са продължени със симулации на процесите на ко-кристализация от два различни вида патчи частици.

Отбелязаните научни приноси и постигнатите резултати от д-р Рангелов откриват възможност за бъдещи изследвания и развиване на фундаменталните познания за елементарните процеси на растежа и разграждането на монокристалите с

важни за практиката технологични приложения. Израстването на силициеви монокристали е в основата на много съвременни технологии за производство на полупроводници, фотоволтаици и др. Дизайнът и управляването на кристалната микроморфология на монокристални пластини е актуален проблем и за създаването на все по-малки по размер, но високопроизводителни компютри и високотехнологични устройства, изградени върху структури с квазиатомен размер. Въпреки, че теоритичните анализи са направени основно за силициеви повърхности, голяма част от изведените зависимости са универсални и касаят процеса на кристалния растеж изобщо.

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

Показател за значимост на научните резултати от изследванията на д-р Б. Рангелов е техният положителен отзвук в научната литература, изражение на което е броя забелязани цитати на публикациите. 24 от публикациите са цитирани 198 пъти според базата данни на Scopus/Web of Science. Върху 18 публикации, включени в конкурса, е приложен списък от 113 цитата (Scopus/Web of Science). По показател Д кандидатът получава 226 т., които около два пъти надвишават необходимите 120т. за длъжност „професор“ съгласно Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИФХ – БАН.

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

Д-р Богдан Рангелов е утвърден учен на много високо научно ниво. Проведените от него (в съавторство) теоретични и експериментални изследвания са прецизно планирани и проведени, а получените резултати са детайлно анализирани и адекватно интерпретирани. Представената авторска справка за научните приноси на кандидата точно отразява постигнатото и маркира нови предизвикателства в близки научни проблеми. Нямам критични бележки и препоръки към научните трудове на кандидата.

7. Лични впечатления на рецензента за кандидата:

Въз основа на представените документи по конкурса и от личните ми впечатления, мога да определя доц. д-р Богдан Рангелов като водещ изследовател с ясно очертана научна тематика, чийто компетентност високо ценя. Резултатите от изследователската му дейност са със значим и безспорни научен и научноприложен принос, свързан основно с изясняване на процесите на фазообразуване в кондензираната материя чрез теоретични изчисления и симулации, както и с планиране и провеждане на високотехнологични научни или приложни електронно-микроскопски изследвания. Научните трудове на кандидата, представени за участие в конкурса, са изцяло в областта на тематичното направление 4.2. Химически науки и по специалност „Физикохимия“. Тематиката на научните му изследвания напълно съответства на тематиката на Лаборатория „Електронна микроскопия и микроанализ“, за чиито нужди е обявен конкурсът. Високата квалификация на доц. Рангелов и неговата международна известност и признание несъмнено ще повишат научното ниво на лабораторията.

В обобщение трябва да се отбележи, че според представените материали по всеки от наукометричните показатели д-р Богдан Рангелов, значително надвишава заложените изисквания към кандидатите за длъжността „професор“ съгласно Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИФХ – БАН.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ: Представените документи и материали от доц. д-р Богдан Рангелов отговарят на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България, Правилника за приложението му и съответния правилник за приложение на закона в ИФХ - БАН. Кандидатът в конкурса е представил достатъчен брой научни трудове, публикувани след материалите, използвани при защитата на ОНС „доктор” и за заемане на академична длъжност „доцент”. Получените резултати от научно-изследователската дейност на д-р Богдан Рангелов представляват оригинални научни приноси, които напълно съответстват и дори надвишават изискванията на ИФХ към научната дейност на кандидатите за заемане на академичната длъжност "професор" в областта на конкурса. С убеденост подкрепям кандидатурата и препоръчам на членовете на уважаемото Научно жури и на почитаемия Научен съвет на Института по физикохимия „Акад. Р. Каишев” – БАН да присъдят на доц. Богдан Рангелов академичната длъжност „професор” в професионално направление 4.2 „Химически науки”, научна специалност „Физикохимия”.

21.08.2020 г.
гр. София

Рецензент:

(проф. д-р З. Черкезова-Желева, член на научното жури)