

## СТ А Н О В И Щ Е

от д-р Даниела Богданова Карашанова, доцент в Института по оптически материали и технологии „Акад. Йордан Малиновски“ – БАН

върху материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“, обявен в Институт по физикохимия - БАН в професионално направление 4.2 Химически науки (Физикохимия).

### 1. Общо представяне

Със заповед № 57-РД-09 от 25.06.2020 г. на Директора на Института по физикохимия (ИФХ-БАН) съм определена за член на научното жури на конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“ в ИФХ-БАН, професионално направление 4.2. Химически науки, специалност „Физикохимия“. В конкурса за „професор“, обявен в Държавен вестник, бр. 20 от 10.03.2020 г. за нуждите на Лаборатория „Електронна микроскопия и микроанализ“ към ИФХ-БАН, като единствен кандидат се е явил доц. д-р Богдан Ставрев Рангелов от същия институт.

### 2. Кратки биографични данни на кандидата

Доцент д-р Богдан Рангелов е завършил висшето си образование със степен „магистър“ по физика във Физически факултет на Софийски университет „Св. Климент Охридски“ през 1995 г. и е назначен на длъжност „физик“ в Института по физикохимия на БАН, където защитава докторска дисертация по специалност „Физикохимия“ през 2009 г. на тема „Нестабилност на вицинални кристални повърхности – групиране на стъпала“. Преминавайки последователно през различните етапи в кариерното си развитие, през 2011 г. е избран за доцент.

В своята научна кариера д-р Рангелов осъществява 4 годишна специализация в Германия – Университета „Фридрих Александер“, Нюрнберг/Ерланген, от 2000 до 2004 г., две специализации в Интердисциплинарния център по нанонауки на Марсилия, Франция – през 2007 г. и 3 месеца през 2018 г. и една двуседмична специализация в Института по физика на полупроводниците, СО-РАН, Новосибирск, Русия през 2010 г. Темите, по които д-р Рангелов работи по време на специализациите си са свързани с процесите и явленията, протичащи върху кристалните повърхности - молекулни реакции на повърхността и каталитични свойства на кристални повърхности Pt(111) и Fe(100), спирален растеж върху кристална повърхност Si(111), вълни на плътността на стъпалата, насочена дифузия на атомни клъстери под действие на външна сила, епитаксиален послоен растеж върху кристална повърхност Si(111). Те са сред най-актуалните теми на съвременното материалознание, сензорика и катализ и намират отражение в тематиката, която д-р Рангелов развива в ИФХ, както и в публикационната му дейност. Експерименталните и аналитични методи, с които се запознава и работи по време на специализациите си са сред най-модерните и съвременни в областта на науката на повърхностите: отражателна електронна микроскопия (REM, reflection electron microscopy), ниско-енергетична електронна микроскопия (LEEM, Low energy electron microscopy), спектроскопия на енергетичните загуби с високо разделяне (HREELS, High resolution electron energy loss spectroscopy) и разбира се необходимата в този тип изследвания прецизна високовакуумна техника. Придобитите от д-р Рангелов опит и знания по време на престоя му в чуждестранните изследователски центрове, както и непрекъснатият му стремеж към нови знания и умения, несъмнено оказват влияние върху качеството на научните изследвания, които провежда и допринасят за оформянето му като един от водещите специалисти в областта на фазообразуването, кристалния растеж, физикохимията на повърхностите и електронната микроскопия. Във връзка с това той получава през 2008 г. награда „Акад. Р. Каишев“ от НС на ИФХ

за научни постижения в областта на физикохимията. Избран е за представител на България в Европейската мрежа по кристален растеж (European Network on Crystal Growth) и за член на Изпълнителния ѝ борд за периода 2015 – 2021 г. Ръководител е на лабораторията по електронна микроскопия и микроанализ на ИФХ, БАН от 2010 г.

### 3. Научно-изследователска дейност

Резултатите от научно-изследователската дейност на доц. д-р Богдан Рангелов са разработени в рамките на 11 финансирани национални проекта и един по двустранното сътрудничество с Франция, както и 2 проекта по ЕБР с Русия и Гърция. Отразени са в 41 научни публикации, в 11 от които д-р Рангелов е първи автор и един патент. Всички публикации са с импакт ранг от базата данни Scopus. Някои от тях са в реномираните в областта на кристалния растеж и физикохимия на повърхностите Physical Review Letters (8.312/2013, 9.199/2019), Journal of Crystal Growth (1.632/2019), Materials Letters (3.019/2018, 3.20/2019), Surface Science (1.86/2009, 1.466/2019).

В обявения конкурс за академичната длъжност „професор“ д-р Рангелов участва с 23 публикации. С тях той напълно покрива минималните изисквания за заемане на тази академична длъжност, отразени в Закона за развитие на академичния състав в РБ и Правилника за неговото прилагане, както и на правилника на ИФХ-БАН и даже значително ги превишава в по-голямата част от показателите.

В тематично отношение научно-изследователската дейност на доцент Рангелов може да се раздели в следните 2 големи области, както самият той ги формулира в справката за авторските приноси:

- I. Електронно-микроскопски изследвания на процеси на фазообразуване в кондензирана материя
- II. Симулационни и теоретични изследвания на процеси на фазообразуване в кондензирана материя

**Към първата област** са включени обстойни експериментални изследвания на двумерно зародишообразуване и кристален растеж (мултислоен островен и спирален) върху вицинална кристална повърхност Si(111), като са определени нейната нестабилност - вълни на плътността на стъпалата и критичната ширина на терасите. Тук се причисляват и изследванията с помощта на електронната микроскопия на процеси на фазообразуване и охарактеризиране на стъкло и стъкло-кристални материали, мека кондензирана материя, тънки филми и катализатори.

Основен принос на кандидата е получаването за първи път на изображения на монотомни спирали (с височина на стъпалото един решетъчен параметър) на растеж/изпарение (и с топологичен заряд единица) върху вицинална кристална повърхност Si(111) с отражателна електронна микроскопия с малко изкривяване на изображението (LODREM). От огромно значение е установяването на специфичните експериментални условия при провеждането на експериментите по хомоепитаксия върху вицинална кристална повърхност Si(111), дали възможност в следствие за определянето на важни характеристики като критична ширина на терасата, температура на прехода между кинетично ограничен и дифузионно ограничен режим на присъединяване на адатоми към стъпалата (респективно кристален растеж), определяне на стойността на степенния показател, който дава отношението (скалирането) между критичната ширина на терасата и стойността на падащия поток от адатоми, и определянето чрез него на големината на критичния зародиш, както и активиращите енергии за двумерно зародишообразуване, изследване на т. нар. „прозрачност“ на стъпалата.

При изследванията, проведени върху стъкло и стъкло-кристални материали, получени при имобилизиране на големи количества металургични отпадъци, приносът

на д-р Рангелов се състои основно в морфологичния, микроструктурен и анализа на елементния и фазов състав, но за получаването на значимите резултати върху тези системи важно е участието му в дискусиите и планирането на експериментите като цяло. Д-р Рангелов участва и в изследването на структурата на множество системи - адсорбирани слоеве от дву-антенни олигоглицини върху различни по вид подложки и с различни концентрации, както и на слоеве от CdS, отложени електрохимично; тънки молибденови филми, отложени върху стомана с помощта на лазерен лъч; Si клъстери в дебели слоеве от полианилин върху подложка от Pt; въглеродни структури с вградено желязо, в следствие на процес на растеж далеч от равновесие – волтова дъга между два въглеродни електрода е атмосфера на Ag и фероцен; нестехиометрични фази на TiO<sub>2</sub>, като „носещ“ материал за нанесен катализатор кобалт; титанови и хромни твърди покрития, получени чрез разбаласирано магнетронно разпръскване и катодно-дъгово разпръскване.

В тези изследвания основният му принос е насочен към установяване на структурата и съществуващото разнообразие от морфологии, определяне на зависимостите между тях и варираните експериментални параметри, идентифициране и доказване на съществуващи фази и др.

**Втората тематична област** обединява резултатите от симулационни и теоретични изследвания на нестабилност върху вицинални кристални повърхности тип вълни на плътността на стъпалата и Монте Карло симулационни изследвания на процеси на дифузия върху вицинални кристални повърхности и е свързана с експерименталните изследвания от формулираната първа област. В част от случаите симулационните действия са проведени за проверка и сравнение с експериментално-наблюдаваните явления, докато в други – резултатите от числените експерименти са инициирали осъществяването на реални. В тази връзка е изследван ефекта на групиране на стъпалата като е приложен нестационарен модел на Бъртън-Кабрера-Франк. Проследено е влиянието на електромиграционната сила и прозрачността на стъпалата. В случая на преход от растеж чрез движение на стъпала към двумерно зародишообразуване е определена критичната ширина на терасата на вицинална кристална повърхност за дадена температура и също е установено влиянието на прозрачността на стъпалата.

Към тази област са и Монте Карло симулационни изследвания на термичната стабилност на метални нановерижки и на частици с анизотропни взаимодействия и дифузионно контролиран растеж в система с два типа частици.

Основни приноси в тази област са теоретичните и симулационни резултати за определяне на енергетичния бариер за вграждане на адатом в „долно“ стъпало на терасата (бариер на Ерлих - Швьобел). Теоретично/симулационно „предречен“ е нов тип нестабилност по време на кристален растеж, а именно т.нар. вълни на плътността на стъпалата (доказани и експериментално от кандидата в съавторство) при формирани пирамидални структури, чиято морфология е изследвана в зависимост от баланса на потоците от адатоми, които „прескачат“ стъпалата в посока „нагоре“ или „надолу“ по стъпалата. Изследвани са процеси на дифузия на адатоми и атомни клъстери върху вицинални кристални повърхности и влиянието на прозрачността на стъпалата, като е предложен сравнително прост модел, разкриващ връзката между температура, заграпяването на стъпалата, външна действаща сила и отношението им към явлението прозрачност на стъпалата.

По отношение на Монте Карло симулациите на термичната стабилност на метални верижки са представени резултати за два случая - свободно стоящи в пространството едномерни монотомни верижки и за двумерни (плоски) хомоепитаксиални верижки върху повърхност fcc (111). В първият случай е проследена загубата на стабилност,

започваща с поява на ваканции, които не се възстановяват и в крайна сметка водят до поява на дупки във верижката и до разпадането ѝ на отделни клъстери. Определено е, че при дадена температура намаляването на силата на взаимодействие между атомите на верижката се явява стабилизиращ фактор. Относно двумерните верижки – изследван е механизмът на скъсването им единствено под действие на термичните флуктуации и е установена зависимост на стабилността им от броя на верижките в двумерната ивица.

В представените материали са разгледани също един разширен модел на дифузионно контролирана агрегация на два типа частици и симулационни изследвания, чийто обект е „по-мека“ кондензирана материя, при която са представени взаимодействията между моделни молекулни комплекси, които не са пространствено симетрични, а са насочени (т.нар. модел на патчи частици).

#### **4. Учебно-педагогическа дейност**

Към тази категория дейности на кандидата е представено съ-ръководството на един успешно защитил докторант.

Тук искам да отбележа, че през годините той е участвал многократно в организирани от ИОМТ Пролетни семинари за докторанти и млади учени „Интердисциплинарна химия“ и с ентузиазъм е споделял с младите хора своите знания и опит. А в проведената от Българското кристалографско дружество през 2019 г. Школа по електронна микроскопия той беше един от основните лектори и със своя експертизъм и оригинално представяне на проблемите на електронната микроскопия и динамиката на вициналните повърхности, спечели вниманието на участниците и допринесе за успешното провеждане на това събитие.

#### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Представените от кандидата в конкурса, **доц. д-р Богдан Ставрев Рангелов** документи и материали напълно отговарят на Закона за развитие на академичния състав в Република България, Правилника за прилагането му и съответния Правилник на ИФХ-БАН и темата на обявения конкурс за „професор“. Те са доказателство, че д-р Рангелов е утвърден учен и има съществен принос в областта на съвременната физикохимия и науката за повърхностите, както и на електронно-микроскопския анализ.

**Напълно убедено давам положителна оценка** на представените в конкурса трудове и дейности и препоръчвам на почитаемите членове на Научното жури да предложат на Научния съвет на ИФХ-БАН доц. д-р Богдан Ставрев Рангелов да бъде избран на академичната длъжност „професор“ в ИФХ-БАН, по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Физикохимия“.

22.08.2020

Изготвил становището: .....

доц. д-р Даниела Карашанова