

## РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент” в професионално направление 4.2. химически науки, Физикохимия, за нуждите на Лаборатория по рентгеноструктурен анализ, обявен от ИФХ-БАН в ДВ брой 33/08.05.2015, с кандидат Георги Вячеславович Авдеев, доктор, асистент в Институт по физикохимия – БАН.

рецензент Росица Петрова Николова, доктор, доцент в Институт по минералогия и кристалография - БАН

### Общи положения и кратки биографични данни за кандидата.

Георги Авдеев е придобил магистърска степен по специалност „Полупроводникови материали и технологии“ в Химикотехнологичен и Металургичен Университет-София през 2007г. Научна степен „доктор“ - Химия на твърдото тяло (шифър: 01.05.18) придобива през 2012г. в Институт по обща и неорганична химия - БАН, където работи в периода 2001-2007г. От 2007г. работи в лабораторията по рентгено-структурен анализ на Институт по физикохимия, а от началото на 2008 до сега е ръководител на тази лаборатория. Като такъв осигурява нормалното функциониране на наличната апаратура, обновяването и разширяване на апаратурния комплекс, интерпретацията на резултатите, формулирането и изпълнението на различни научни задачи, свързани с физико-химичните свойства на нови и модифицирани неорганични материали.

### Описание на представените материали

Д-р Авдеев документира научно-изследователската, приложната, педагогическата и обществената си дейност, развита след придобиване на научна степен „доктор“ през 2012г. както следва:

- ✓ Научни публикации на кандидата за периода 2004-2015г. – 59
- ✓ Научни публикации на кандидата за периода 2004-2015г. , които не повтарят представените за придобиване на образователната и научна степен „доктор” – 51, от които 43 в списания с импакт фактор, като 2 от тях са в списание Appl. Catal. В Environ с *импакт фактор 6.007* , а 15 са в списания с *импакт фактор над 2*. В 3 от публикациите кандидата е първи автор и в 1 е самостоятелен автор. През последните 5 години са публикувани 39 от посочените публикации.
- ✓ Автореферат на дисертацията на кандидата за придобиване на образователна и научна степен „доктор” - посочените в автореферата 4 публикации не са включени в

списъка, с който кандидата участва в конкурса за заемане на академична длъжност „доцент“

- ✓ Цитирания на за периода 2004-2015г. – **241**, кандидата посочва 247, но 6 от тях са скрити автоцитати (номера 44, 107, 119, 126, 166 и 212). Тези автоцитати са на публикации, които имат по-вече от 15 цитата и премахването им не повлиява стойността на **H-индексът** на кандидата, който е **9**.
- ✓ Изследователски проекти, в които кандидата е участвал за периода 2004-2015г – **7**  
Кандидата показва участие в 7 изследователски проекта описани в приложение и един проект за изграждане на нова лаборатория с наименование: "Високотехнологична лаборатория за специализирани рентгенови методи и томография за развитие на еко и енергоспестяващи технологии и технологии свързани със здравето" на стойност 1 670 302 лв. За последния не са посочени данни в списъка с проекти, който кандидата предоставя, но имам информация за това от директора на институт по физикохимия. Четири от научноизследователските проекти са финансирани от Фонд научни изследвания, един по проект към НАТО и два по проект "QSIL" от QSIL-Германия.
- ✓ Доклади, представени от кандидата на международни и национални научни форуми за периода 2004-2015г. – **20**

Описаните по-горе документи доказват, че кандидата отговаря на всички изисквания на Закона за развитието на академичния състав в Република България, правилника към него и правилника на институт по физикохимия "Акад. Р. Каишев" за прилагане на посочения горе закон за заемане на академичната длъжност „доцент“ (условието по чл 2. т.4.3. и изискванията по чл. 11 от правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в института по физикохимия "Акад. Р. Каишев" към Българска Академия на Науките)

#### **Обща характеристика на научно-изследователската и научно-приложната дейност на кандидата**

Основната компетентност на кандидата е в използването на рентгено-дифракционни методи за охарактеризиране на нови и модифицирани кристални материали и е пряко свързана с обявеното в конкурса професионално направление химически науки, Физикохимия (4.2.). Дифракционните методи са безспорно с най-висока точност и поради това широко използвани при анализа на твърди вещества. Рентгеновата дифракция, като един от най-достъпните дифракционни методи е и най-големият източник на информация за

кристалната структура като цяло. Въз основа на рентгенова дифракция могат да се определят фазовите отношения (качествени и количествени) в дадена природна или синтетична система; степента на кристалинност на изследваното вещество; размера на кристалитите; може да служи за определяне и уточняване на кристалната структура; регистрация на фазови преходи и т.н. И въпреки че рентгенодифракционните методи се използват по-вече от 100 години и се възприемат, като рутинни при работа с кристални материали, съвременното материалознание поставя специфични задачи, свързани със синтеза и характеристиката на веществата и свойствата им, изискващи усъвършенстване на познатите методи и разработване на нови подходи, за което е необходима комплексна подготовка по физика, химия, математика и симетриен анализ.

### **Основни научни и научно-приложни приноси**

Проблемите, които кандидата решава в изследванията, чиито резултати са представени в приложените за рецензиране публикации могат да се обобщят в четири основни групи:

1. Определяне на размер на кристалити на наноразмерни фази на границата на детектиране;
2. Синтез и структурно охарактеризиране на нови съединения и материали;
3. Количествен фазов анализ на многокомпонентни композити и керамики;
4. Рентгенографски изследвания на тънки филми;

#### Определяне на размер на кристалити на наноразмерни фази на границата на детектиране.

Изследването на връзката между размера на кристалитите и свойствата на даден материал е изключително важно, особено когато става дума за наноразмерни фази, защото поради високата си специфична повърхност те предполагат повишена реакционна способност и голяма активност. Използването на рентгенофазов анализ за определяне присъствието на дадена фаза или размера на кристалитите на веществата е рутинен подход. Когато обаче става дума за кристалити с размери до 10 nm и количества под 5% от общия обем предизвикателството пред изследователя е голямо, защото се достигат границите за детектиране на метода и апаратурата. Затова се изискват специфични подходи при подготовка на пробите и оценка на резултатите. В десет от предоставените за рецензиране публикации (2, 5, 8, 9, 22, 33, 34, 36, 44, 49) кандидата е част от научно-изследователски групи, изучаващи различни системи от катализатори, като безспорният му принос в споменатите изследвания е разработването и прилагането на специфична методология за работа с наноразмерни фази на границата на детектиране, което позволява да се решат задачи, свързани с:

- Оптимизиране на условията за получаване на златни катализатори с  $\text{CeO}_2$  (9) и комбиниран  $\text{CeO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$  носители (2, 5). Последните две изследвания позволяват определянето на оптималното съотношение на  $\text{Ce}^{3+}$ , кислородни ваканции и положително заредени наноразмерни златни частици. Прави се оценка на влиянието на количеството на алуминий в решетката на  $\text{CeO}_2$  и др.
- Изясняване на причините за различните каталитични активности на материали, получени в системите  $\text{Au/CeO}_2\text{-Fe}_2\text{O}_3$  и  $\text{PdAu/CeO}_2\text{-Fe}_2\text{O}_3$  и синтезирани по два метода, механохимичен и чрез импрегниране (33, 44, 49). Показано е, че в случая механохимичното активиране е по-подходящият метод, тъй като води до получаване на материали с повишена концентрация на повърхностни структурни дефекти. Изследвано е и влиянието на  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , като част от носителя и е изяснена причината да не се образуват кислородни ваканции, при добавяне на  $\text{Fe}^{3+}$  йони.
- Изучаване на влиянието на  $\text{ThO}_2$  върху фотокаталитичната активност на чист  $\text{TiO}_2$  и дотиран с  $\text{Ce}$  -  $\text{TiO}_2$  (22). Показано е, че за материалите, получени чрез предложената методика фотокаталитичните свойства на  $\text{TiO}_2$  с 1%  $\text{ThO}_2$  са по-добри от тези на  $\text{TiO}_2$ , получен по същата методика.
- Изясняване на връзката структура – свойства при катализатори за електрокаталитично окисление на метанол от системата  $\text{Pt}(\text{Cu})/\text{C}$  (36). Доказано е частично сплавяне на  $\text{Pt}$  и  $\text{Cu}$ , както и формирането на  $\text{CuO}$  и  $\text{Cu}_2\text{O}$  слоеве по повърхността на  $\text{Cu}$ , която е използвана като прекурсор.
- Изследване на разликите в каталитична активност на материали, получени на база на  $\text{Ni-W/TiO}_x$  композитни слоеве, отложени върху оксидирани и неоксидирани въглеродни нано-гръбички (8).
- Изясняване на влиянието на механохимичното активиране върху кристалната структура и фотокаталитичните свойства на  $\text{ZnO}$  (34). Проследяват се режимите на активиране върху средния размер на кристали от  $\text{ZnO}$  и микронапреженията в тях. Доказано е, че обработката на  $\text{ZnO}$ , предизвиква появата на клъстери от кислородни ваканции и натрупване на дефекти в активирания материал. Най-висока фотокаталитично активност показват проби активирани за кратко време и при ниска скорост.

Описаните резултати са публикувани в списания с висок импакт фактор (*Appl. Catal. B Environ* 6.007, *Chem. Eng. J.* 4.058, *Int. J. Hydrogen Energy* 3.94 и др.) и са едни от нацитираните публикации на кандидата от представените от рецензиране.

Синтез и структурно охарактеризиране на нови съединения и материали.

Структурната характеристика на материалите е в основата на всяко изследване, свързано с изучаване на нови или модифицирани познати фази. Най-прецизен и нееднозначен е разбира се монокристалният рентгеноструктурен анализ, но за съжаление получаването на подходящи монокристални образци не винаги е възможно или по-скоро не винаги е финансово и времево оправдано. Ето защо дифракцията от поликристални прахови образци остава незаменим източник на данни за кристалната структура. Спецификата на праховия метода предполага изследване на двумерен дифракционен образ (за разлика от тримерния при монокристален анализ) и получаването на достоверна информация за кристалната структура изисква прецизно набране на данни, разумно използване на програмите за индексирание и детайлно познаване на методите за определяне и уточняване на кристална структура. В девет от представените за рецензиране публикации (6, 10, 17, 18, 23, 24, 26, 29, 51) кандидатът е допринесъл за осъществяване на поставените задачи, чрез коректна интерпретация на получените данни за определяне и уточняване на структурните параметри на нови неорганични и органични съединения, както следва:

- Обобщени са експериментални рентгенографски и теоретични данни за катионното разпределение в шпинели от вида  $\text{LiMn}_{2-y}\text{Ti}_y\text{O}_4$  ( $0 < y \leq 1.0$ ) (1, 48, 51). Изследванията са по тематиката на докторантурата на кандидата. Тъй като бях рецензент на докторската му дисертация и познавам работата му, трябва да отбележа, че кандидата има голям опит в синтеза на шпинелни материали за различни приложения, както и в интерпретацията на резултати от термоаналитични, електронно микроскопски, електрохимични, Мьосбауеров и фотоелектронно спектроскопски анализи. Освен това е един от малкото учени в БАН, които владеят и използват прецизно метода на Ритвелд.
- Определени са структурни параметри и е предложен структурен модел за  $\text{Bi}_{36}\text{MgP}_2\text{O}_{60-6}$  със силенив тип структура (23); Уточнени са структурните параметри на  $\text{Bi}_2\text{Mn}_4\text{O}_{10}$  с  $\text{DyMn}_2\text{O}_5$  тип структура (24) и на  $\text{BaBiBO}_4$  и  $\text{CaBi}_2\text{B}_2\text{O}_7$  и двете с  $\text{B}_2\text{Bi}_2\text{CaO}_7$  тип структура (18).
- Уточнени са структурните параметри на  $\text{La}_2\text{CoMnO}_6$  (29) и на перовскити от вида  $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+x}$  (R La, Nd, Gd, Y и Ho) (17). Индексирането на получените образци показва, че двойните перовскити с тази формула кристализират в различни симетрии според вида на заместване R = La – кубична, R = Nd, Gd - орторомбична, и тетрагонална за R = Y.
- Индексирание и уточняване на структурни параметри на неравновесни фази от системата Zn-Cr (10).
- Получаване на стабилизирани  $\beta$  – cristobalite (26) чрез двойно заместване с Ca и Al в съотношение 1:2. Разработен и теоретичен модел според който алуминиевите атоми

заемат позициите на силициевите в структурата на кристобалита, а калциевите заемат пространството в пръстените образувани от Si-O тетраедри.

- Структурно охарактеризиране на 3-acetyl-6-methoxy-2H-1-benzopyran-2-one,  $C_{12}H_{10}O_4$  (6).

#### Количествен фазов анализ на многокомпонентни композити и керамики.

В 22 от представените публикации (4, 12, 13, 14, 15, 19, 20, 21, 25, 27, 28, 31, 35, 37, 38, 39, 40, 42, 43, 45, 48, 50) рентгеновата дифракция е използвана за количествен анализ на смеси и композитни материали. При изследване на подобни многокомпонентни системи количественият фазовият анализ изисква внимателен подбор на начина за подготовка на пробите както и на експерименталните условия. Разбира се предизвикателство е и интерпретацията на данните, за да може всяка от присъстващите фази да бъде ясно разграничена и получените резултати да съответстват на общия химичен състав. Кандидата прилага методи, използващи пълно профилно съвпадение на експериментални данни и теоретичен модел за решаване на различни задачи, изискващи фазова характеристика на кристални материали:

- Проследяване на етапите на синтез и на термично разлагане на неорганични съединения – керамики и стъкла, както и формиране и деградация на антикорозионни покрития (4, 13, 14, 20, 21, 25, 27, 28, 31, 39, 40, 43, 45, 50.)
- Структурното охарактеризиране на  $\gamma$ - $Mn_2C_2O_4 \cdot 2H_2O$  и количествената оценка на продуктите от разлагането му  $Mn_3O_4$ ,  $Mn_5O_8$  (48).
- Структурна характеристика на керамики получени от индустриални отпадъци и каолин (37). За изследването кандидата използва специфична методика, чрез използване на вътрешен стандарт за намаляване на грешката за фазовите данни.
- Уточняване на сплавяне и кристализация от преситени разтвори (15, 19, 38, 42.)
- Получаване на въглеродни фази и тяхното фазово и структурно охарактеризиране с рентгенова дифракция с цел разработване на нови методи (12 и 35.)

#### Рентгенографски изследвания на тънки филми.

Обикновено тънките филми са текстурирани и кристалографски разориентирани спрямо подложката, което налага специфичен подход при използване на рентгеноводифракционните методи. Кандидата разработва метод, достъпен за всеки модел дифрактометър за първоначално извеждане в отразяващо положение на изследваните тънки филми. Метода е приложен за решаване на задачи, свързани с:

- Получаване на тънки филми от  $YVO_4$  дотиран с Nd (материал за изработка на диодно напompвани твърдотелни лазери (3, 7, 16).

- Получаване на наноструктурирани материали за електрониката (32, 41, 47).
- Изучаване на тънки филми от въглеродни фази (11, 46).
- Изследване на повърхност на  $\text{Ag}_2\text{Te}$  and  $\text{Ag}_5\text{Te}_3$  (30).

### **Отражение на научните публикации на кандидата в българската и чуждестранната литература**

Не бих могла да разделя научната литература на българска и чуждестранна, защото когато едно списание публикува интересни (цитируеми) за научната общност като цяло резултати от изследвания според мен няма значение дали е българско, италианско или американско. Факта, че автора публикува в списания с висок импакт фактор и има 241 цитата (в импакт факторни списания) на своите 43 публикации за мен е достатъчен, за да твърдя, че изследванията на колективите, в които кандидата допринася, чрез познанията си в областта на дифракционния анализ са интересни и полезни за научната общност като цяло.

**Критични бележки и препоръки** по представените трудове, включително и по литературната осведоменост на кандидата нямам.

### **Лични впечатления на рецензента за кандидата**

Познавам кандидата, като мой колега използващ рентгено дифракционния анализ за решаване на различни проблеми на материалознанието. Смятам, че освен посочените чисто „наукометрични“ показатели, Георги Авдеев е специалист, който винаги приема предизвикателствата на нестандартните задачи. Участва активно в дейностите на Българско кристалографско дружество, свързани с разпространяване на познанията по кристалография и подобряване на професионалната квалификация на младите учени в страната.

**В заключение** мога да кажа, че *обемът на представените за рецензиране материали далеч надминават изискванията за заемане на академичната длъжност „доцент“*. Затова убедено препоръчвам на Уважаемия научен съвет на Институт по Физикохимия избере д-р Георги Вячеславович Авдеев за академичната длъжност “доцент”.

4.09.2015.

Рецен:  
доц. д-

а