

С Т А Н О В И Щ Е

ОТ

проф. д-р инж. Венцеслав Стефанов Василев

относно конкурс за присъждане на академичната длъжност „ПРОФЕСОР“

В

професионално направление 4.2. „ХИМИЧЕСКИ НАУКИ“ (специалност 01.05.18 „Химия на твърдото тяло“) за нуждите на ИОНХ-БАН

с единствен кандидат

доц. д-р ДАНИЕЛА ГЕОРГИЕВА КОВАЧЕВА

I. Общи положения

Конкурсът за „ПРОФЕСОР“ е обявен в ДВ бр.10 от 03.02.2012 г. за нуждите на лаборатория „Кристалохимия на композитни материали“ (ИОНХ-БАН).

Кандидатът доц. д-р Даниела Г. Ковачева завършва СУ „Кл. Охридски“ през 1983 г. – специалност „Физика“. През 1992 г. защитава дисертация в ИОНХ-БАН на тема „Влияние на катионните замествания върху структурата и свойствата на високотемпературните свръхпроводници“ по шифър 01.05.18, а през 1999 г. придобива научното звание „ст.н.с. II ст.(доцент)“. През 1990 г. взема участие в „Експерименталната школа по високотемпературни свръхпроводници и сходни материали“ в Международния център по теоретична физика, гр. Триест (Италия), а през същата година специализира (6 месеца) в Института „Макс фон Лауе-Пол Ланжвен“ в Гренобъл (Франция) в областта на методите за определяне на кристалната структура на неорганични материали.

II. Приноси

Научните и научноприложните приноси на доц. Даниела Ковачева са в областта на материалознанието и с основна тежест в подобластта „химията на твърдото тяло“, като са пряко свързани с получаването и структурното охарактеризиране на нови фази (с постоянен и променлив състав) и композити на тяхна основа. Изследвани са и основни техни свойства с цел конкретно им приложение или на базата на тези свойства се предлагат други възможни приложения. По-общо казано, всички изследвания, с които доц. Д. Ковачева участва в конкурса (42 на брой), са взаимосвързани, като логично следват и затварят основната схема на класическото материалознание:

синтез→структура→свойства→ приложение.

A. Научните приноси са свързани с получаването на нови данни и потвърждаване, разширяване и доразвитие на известни такива

► на базата на подходящи субституции в основни структури са получени **нови фази с постоянен състав и са охарактеризирани техните структури:**

- Ba_2ABiO_6 (A=Ce,Pr,Nd)-[2];

- $Bi_{0,25}R_{0,25}Ca_{0,5}Mn$ (R=La,Nd,Ho) и $Bi_{0,5}A_{0,5}Fe_xMn_{1-x}O_3$ (A=Ca,Sr)-[11,13,15,25];

- (M=Zn,Mn), $Li_2MSn_3O_8$, $Li_2MTi_3O_8$ (M=Zn,Mg) и $Li_2MSn_3O_8$ (M=Co,Fe,Mg)-[6,8,16,20];

► чрез промяна на съотношенията между металите в А- и В-подрешетките на базовите фази са получени **нови фази с променлив състав:**

- $LiCr_xMn_{2-x}O_4$ ($0 \leq x \leq 1$) и $LiNi_xMn_{2-x}O_4$ ($0,0 \leq x \leq 0,5$)-[7];

- $Zn_{2-x}Mg_xSnO_4$ ($0 \leq x \leq 2$)-[4]; $(Li_2MnO_3)_x(LiNi_{1/3}Mn_{1/3}Co_{1/3}O_2)_{1-x}$ (x=0; 0,3; 0,5 и 0,7-[37];

- $YCr_{1-x}Fe_xO_3$ ($0 \leq x \leq 1$)-[26,33,34]; $Pb_{1,33}(Sr_{1-x}Ba_x)_{0,67}Fe_2O_5$ ($0,00 \leq x \leq 0,67$)-[27,31];

- $Pb_{0,5}La_{0,5}Fe_{1-x}Mn_xO_3$ ($0 \leq x \leq 1$)-[35];

- $PbBaFe_{2-x}Co_xO_5$ ($0 \leq x \leq 1$) и $PbBaFe_{2-x}Mn_xO_5$ ($0,0 \leq x \leq 1,5$) -[38,39,42];

► на базата на натрупаните знания и опит доц. Д. Ковачева използва широк арсенал от методи за получаване на изследваните образци, в зависимост от целите които преследва, като едновременно с това тя ги развива, добавя нови елементи в тях, променя алгоритъма и условията на тяхното реализиране, например:

- **горене на разтвор** – на базата на метални нитриди + органично „гориво“, успешно модифициран в някои от синтезите като метод „спрей-горене“. В качеството на „гориво“ са използвани уреа, захароза, глицерин, лимонена киселина и др. [5,7,9,10,12,18,20,21, 27,31,40];

- **спрей-пиролиза** [2];

- **директен и индиректен синтези** [11,13,15,25,26,33-35];

- **термично разлагане** [21];

- допълнително термично третиране след синтезиране [5,7,9,10,12,18,21,36 и др.];
- съутаяване и разлагане чрез облъчване с ултразвук (синихимичен синтез)-[41].

► изследвани са основни свойства на синтезирани нови фази и твърди разтвори на тяхна основа в зависимост от различни структурни и физикохимични фактори (метод на получаване, тип на структурата, размер на частиците, концентрация на субституиращия метал и съотношението между металите в А- и В-подрешетки на материалите с шпинелна, перовскитна и перовскитоподобна структури, температура, газова среда и др.). Паралелно с това се акцентува върху корелацията по „оста“ структура↔свойство, която има фундаментално значение при получаването на материали с предварително зададени свойства предвид тяхното бъдещо практическо приложение.

Тук си позволявам да не цитирам конкретни статии, защото практически в почти всички от тях зависимостта между структурата и свойствата на конкретния материал е била обект на задълбочено изучаване и интерпретиране;

► на базата на проведените комплексни изследвания с използването на съвременна апаратура са предложени различни механизми и модели за протичане на редица процеси, отговорни за протичащи структурни промени, рефлектиращи пряко или косвено върху определени свойства на получените материали. Например:

- високата стабилност и капацитет при продължително циклиране и стареенето при високи температури и потенциал (4,5 V) на електроди, изработени от наноразмерни материали със състав $\text{LiNi}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{O}_2$, което се дължи на химични реакции, протичащи върху повърността електрода, с образуване на междинни съединения (28,32), които водят до нейното пасивиране. В резултат на това основната маса от активния материал остава непроменена, а електродът запазва добри електрохимични характеристики и след стареене при 70 °С;

- изучен е механизмът, по който протича реакцията на горене при синтез на катодни материали със слоеста и шпинелна структура за обратими Li-батерии, като при компустивната реакция с последващо плавно нагряване, се получава един и същи продукт, независимо от средата (вакуум, инертна атмосфера). Установено е, че в процеса на реакцията протича частична карамелизация на захарозата, която взаимодейства с Me-нитрати по окислително-редукционен механизъм [30];

- получени са нови данни относно сензорните свойства на б нови фази със състав $\text{Zn}_{2-x}\text{Mg}_x\text{SnO}_4$ ($0 \leq x \leq 2$). Предложен е механизъм на трансформации в тетраедричните позиции на шпинелната структура, водещи до по-висока концентрация на хидрониевите йони и протони на повърността на образците, в резултат на които се повишава тяхната проводност и влагочувствителност [4];

- предложен е механизъм за образуване на нов стабилен двойно-хексагонал тип структура при заместване на двувалентните йони в шпинелите Me_2SnO_4 (Me=Zn,Mg) с подходяща комбинация от Li- и Sn-йони. Посочени са факторите, които управляват катионното разпределение в двойно-хексагоналната структура [6,8,16,20];

- предложен е модел, според който видът на редкоземния елемент и средата (влажен или сух въздух) определят морфологията и проводимостта (полупроводников или протонен) на тънки слоеве с перовскитна структура и състав $\text{Ba}_2\text{MeBiO}_6$ (Me=Ce,Pr,Nd)-[2];

- изучен и доказан е механизъм, обесняващ възможността за плавно и целенасочено изменение на магнитните свойства на получените нови фази $\text{PbBaFe}_{2-x}\text{Cox}_5$ ($0 \leq x \leq 1$) в резултат на заместване на Fe- с Co-йони в В-подрешетката на перовскитоподобните блокове в структурата [39,39,42];

Б. Научно-приложни приносите се отнасят до:

► проведени са комплексни изследвания, при които чрез използване на богат арсенал от методи и вариране на условията на синтез са получени серия перспективни катодни материали за Li-батерии с различен химичен съставполучен в резултат на подходящи субституции и променящо се отношение между между Ni:Mn:Co, в това число с постоянен и променлив размер на частиците (от няколко нанометра до няколко микрометра), както в обемно, така и в тънкослойно изпълнение [5, 7,9,10,12,14,17-19,22,23,28-30,32,37];

► изследва основни електрохимични характеристики на разработените катодни материали в реални работни условия, като прави полезни заключения с практическа насоченост: тънкослойните електроди от наноразмерен активен материал показват по-добри характеристик от тези електроди, изработени от микроразмерен шпинелен материал [14,22]; доказано е влиянието на циклирането при различни температури на слоести оксидни фази [17], както и влиянието на средния размер и разпределението на кристалитите в монофазни [28,32] и композитни материали [37]; Co-йони в някои шпинелни и слоести катодни материали, получени по комбустивния метод (горене на раз-

твор от Ме-нитрати и захароза) с последващо третиране при 400 °С, имат определен стабилизиращ ефект върху функциите на катода [30]; наноразмерните катодни материали с шпинелна и слоеста структура се пасивират бързо при контакт с електролита, което гарантира значително по-висока стабилност на кинетичните характеристики [19,29].

► на базата на изучените структура и температурни зависимости на магнитните характеристики на една група материали с перовскитова и перовскитоподобна структура е направено заключение за тяхната перспективност за приложение в различни електронни устройства [26,33,34];

► изследвайки химизма на (Cu-Sn)-нанокompозити в процеса на електрохимично литиране е показана тяхната перспективност като алтернативни анодни материали в Li-батерии [24].

III. Наукометрични показатели на кандидата

▪ Научни публикации

- общ брой на публикациите – 133, от които 85 са публикувани в списания с IF при обща цитируемост – 694; общ H-индекс на кандидата – 14;

- в конкурса за „доцент“ са използвани 33 публикации;

- в настоящия конкурс за „професор“ доц. Д. Ковачева участва с 42 публикации (отделени в самостоятелен списък), 30 от тях са в списания с IF (общ IF=82,64; индивидуален IF=13,173); забелязани цитати – 353; H-индекс на кандидата за конкурса е 11;

- всички научни научни съобщения по конкурса са публикувани в периода 1999-2012 г. с продуктивност 3 статии/год.; средна численост на авторския колектив - ≈ 6 автора/статия; минимален и максимален брой на авторите в една публикация, съответно 1 и 17; в 1 статия доц. Д. Ковачева е единствен автор, в 5 тя е на I^{во} място, в 18 – на II^{во} и в 8 - на III^{то}.

▪ Ръководство и участие в научноизследователски проекти

- съръководител на 1 проект, финансиран от ЕС (ЕС-INCO-СТ-2005-о16414-MISSION);

- проекти, финансирани от MOMH-НИ: ръководител – 5; член на колектива – 5; двустранен с Р. Македония – 1;

- по междуакадемични спогодби: с Института по материалознание – Мадрид (Испания) – като участник – 3; с Университета Бар Илан в Раман Ган (Израел) – ръководител – 3.

▪ Учебно-преподавателска дейност: ръководство на докторанти – 3, от които 2^{ма} са защитили; ръководство на дипломанти – 3; ръководство на курс-лекции по програма на Центъра за обучение на докторанти към ЦУ - БАН 3; единични лекции по РФА в ХТМУ.

IV. Лични впечатления и препоръки

Познавам доц. Д. Ковачева от лични контакти, свързани с решаване на научни проблеми в областта на рентгенофазовия и рентгеноструктурен анализ. Впечатлен съм от нейната професионална компетентност, актуатност, прецизност и отговорност. Тя е един изграден специалист в областта на неорганичното материалознание и по-точно в една от основните ѝ подобласти – химия на твърдото тяло. Бих си позволил да отправя към нея следните препоръки за бъдещата ѝ дейност:

- да прецизира използването на израз от типа „нови фази със състав $PbBaFe_{2-x}Co_xO_5$ ($0 < x < 1$)“, срещани на няколко места в „Авторската справка“;

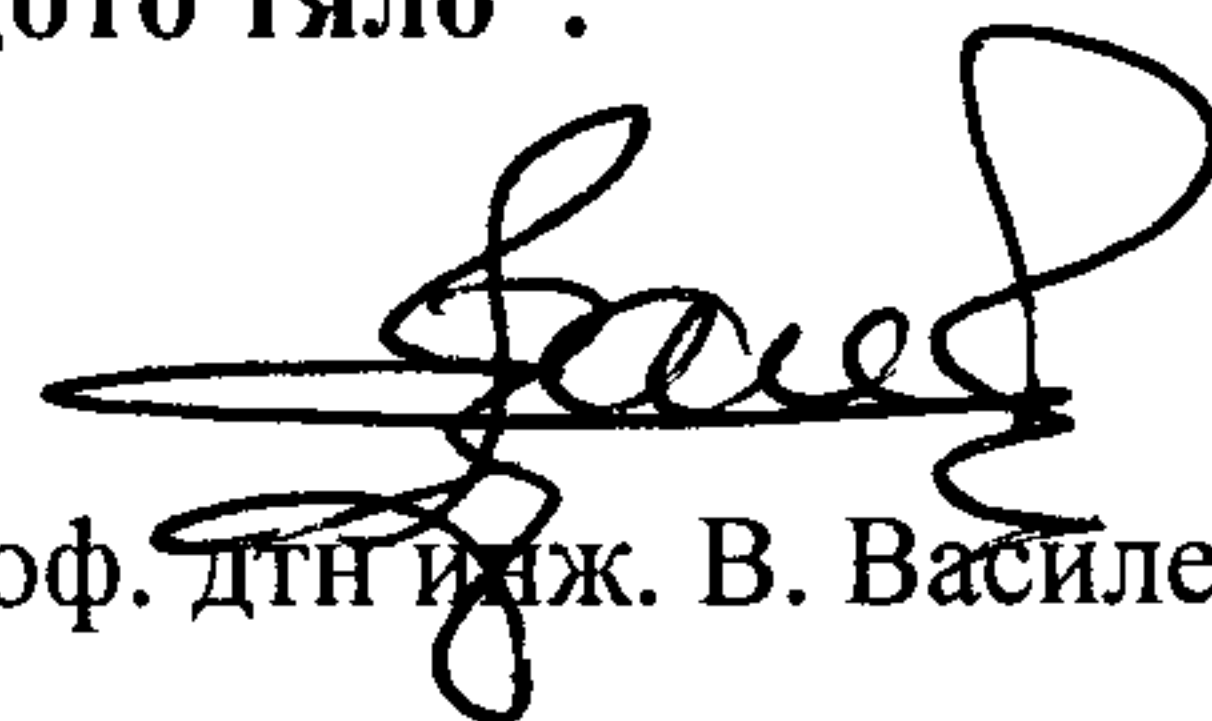
- независимо от комплексния характер на изследваните проблеми и необходимата задължителна екипност за тяхното решаване, смятам че е необходимо да помисли за оптимизиране на средната численост на научния колектив в отделните научни статии;

- да разшири и активизира участието си в учебно-преподавателските дейности на базата на нови контакти с отделни преподаватели и изследователски групи в различни университети.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Като имам предвид целокупната научноизследователска и преподавателска дейност на кандидата и препоръчителните наукометрични показатели на ИОНХ (БАН), определено смятам, че доц. д-р Даниела Ковачева е изграден висококвалифициран специалист, поради което убедено предлагам да ѝ се присъди академичната длъжност ПРОФЕСОР в професионално направление 4.2 „Химически науки“ по научна специалност 01.05.18 „Химия на твърдото тяло“.

Подпис:



(проф. д-р инж. В. Василев)

София, 14.05.2012 г.