

## РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за заемане на академичната длъжност „Професор”  
по професионално направление 4.2.Химически науки (неорганична химия),  
обявен в ДВ бр. 47/04.06.2021 г. от Института по обща и неорганична химия-БАН  
за нуждите на лаборатория „Солеви системи и природни ресурси“

Рецензент: професор д-р Екатерина Жечева от Института по обща и неорганична химия  
- БАН

### Общи положения и кратки биографични данни за кандидата

В конкурса за доцент по направление 4.2. Химически науки (неорганична химия) обявен от Института по обща и неорганична химия – БАН в ДВ бр. 47/04.06.2021 за нуждите на лаборатория „Солеви системи и природни ресурси“ участва един кандидат – доцент д-р Диана Тодорова Рабаджиева от ИОНХ-БАН.

Доцент д-р Рабаджиева се е дипломирала през 1986 г. в Химико-технологичния и металургичен университет - София като инженер-химик, специалност „Технология на неорганичните вещества“. В периода 1986-1988 г. тя работи в Института по химическа промишленост – София, а през 1990-1993 г. – в Химико-технологичния и металургичен университет – София, катедра „Неорганична химия“ като химик. През 1994 г. постъпва в Института по обща и неорганична химия – БАН, отначало като химик, а от 1997 г. като асистент и главен асистент. През 2003 г. защитава докторска дисертация по специалността „Неорганична химия“ на тема „Кристализационни процеси от морски тип и някои приложения“ под ръководството на проф. Христо Баларев. Избрана е за доцент в ИОНХ по специалността „Неорганична химия“ през 2012 г.

Цялостната научно-изследователска дейност на Диана Рабаджиева в Института по обща и неорганична химия протича в Лаборатория „Солеви системи и природни ресурси“, а от 2017 г. тя е и ръководител на тази лаборатория.

### Описание на представените материали

Доцент Рабаджиева е представила списък на цялостната си научна продукция: 76 научни труда, от които 41 в списания с импакт-фактор или импакт-ранг. В конкурса за професор тя участва с 20 научни труда, 6 от които са причислени към хабилитационния труд. Всички работи от хабилитационния труд са публикувани в специализирани международни списания с импакт-фактор и са разпределени по квартали (Q), както следва: Q1 – 4 работи (Desalination с импакт-фактор  $IF_{2014}=3.756$ , Journal of Biomedical Materials Research A с  $IF_{2019}=3.525$ , Pure and Applied Chemistry с  $IF_{2014}=2.492$  и Journal of Trace Elements in Medicine and Biology с  $IF_{2020}=3.245$ ); Q2 – 1 работа (Environmental Monitoring and Assessment с  $IF_{2018}=1.959$ ); Q3 – 1 работа (Journal of Solution Chemistry с  $IF_{2016}=1.342$ ).

Работите извън хабилитационния труд се причисляват към следните квартали: в Q1 – 5 работи (Journal of Trace Elements in Medicine and Biology, Dental Materials, Journal of Sol-Gel Science and Technology, International Journal of Mineral Processing, Pure and Applied Chemistry), в Q2 – 4 работи, в Q3 – 1 работа, в Q4 – 1 работа, в списания с импакт-ранг, но без импакт-фактор – 3 работи.

По данни на кандидатката, върху цялостната ѝ научна продукция са забелязани общо 275 цитирания отразени в базите данни Web of Science, Scopus и Google Scholar, като разпределението им определя фактор на Хирш 10. След хабилитацията ѝ в базите данни Web of Science и/или Scopus са забелязани общо 190 цитата, като цитатите върху работите по конкурса са 63.

Доцент Рабаджиева е участвала в голям брой научно форуми у нас и в чужбина – приложеният списък включва общо 170 заглавия на доклади за цялостната ѝ научна дейност, като броят на докладите, отнасящи се за периода след хабилитацията ѝ, е 68. Приложени са и резюмета от докладите.

Доцент Рабаджиева има и активна проектна дейност. Тя е участвала в 5 проекта с външно финансиране за изграждане на международни научни мрежи и в 14 научни и инфраструктурни проекти финансирани по линия на Фонд „Научни изследвания“ или Министерство на образованието и науката, като на два от тях е била ръководител. Била е член на колектива на международни проекти по линия на COST и на ЕБР на БАН, както и в научно-приложни проекти, финансирани от частни фирми. През целия период 2014-2021 г. тя е участник във вътрешноинститутския проект за развойна дейност „Химия на водно-солеви системи за оползотворяване на природни минерални ресурси и отпадни продукти, в частност морски химически ресурси“.

Кандидатката е участвала в редица приложни разработки, като най-важните са технологиите за производство на  $Mg(OH)_2$  и  $MgCO_3 \cdot 3H_2O$  от отпадни луги на морския солодобив и технологията и внедряването в производство на продукти от сериите „Солилуг“ и Sea Stars”.

Г-жа Рабаджиева е била научен ръководител на докторант, защитил в ИОНХ през 2019 г. Понастоящем е съръководител на докторант на самостоятелна подготовка в ИОНХ-БАН

Всички представени от доцент Рабаджиева материали са по тематиката на конкурса.

Представена е справка за изпълнението на изискванията на Института по обща и неорганична химия - БАН за заемане на академичната длъжност „Професор“ посочени в Правилника на Института за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности. Наукометричните данни на доцент Диана Рабаджиева значително надхвърлят изискванията.

### **Обща характеристика на научно-изследователската дейност на кандидатката**

Основните научни интереси на доцент Рабаджиева са в областта на химията на водно-солевите системи и по-специално стабилните и метастабилните фазовите равновесия и формите на съществуване на елементите в многокомпонентни водно-

солеви системи. Изследванията могат да се причислят към неорганичното материалознание и екологията, тъй като крайната им цел е разработването на методи и технологии за получаване на неорганични вещества с желани свойства или оценка на екологичното поведение на природни повърхностни водни системи. Отличителна черта в публикациите на кандидатката е едновременното прилагане на термодинамично моделиране и експериментални изследвания за прогнозиране на поведението на системите.

В тази научна област са и публикациите от хабилитационния труд на доцент Рабаджиева. Те съдържат изследвания върху три различни многокомпонентни водно-солеви системи: (i) водно-солеви системи от морски тип; (ii) системи на основата на калциеви фосфати в среда от симулирани тъканни течности и (iii) природни системи включващи повърхностни води, водни почвени разтвори и растителност. Тези публикации не могат да бъдат тематично обединени, но демонстрират ефективността на възприетия от кандидатката подход на изследване, а именно съчетаването на термодинамични и експериментални изследвания за изучаване на многокомпонентни водно-солеви системи.

Част от публикациите извън хабилитационния труд са свързани тематично с тези от хабилитационния труд, а именно синтез и охарактеризиране на калциево-фосфатни биоматериали (5 публикации) и динамика на концентрацията на преходните метали от природни води и почви (2 публикации). Тематиката на другите публикации извън хабилитационния труд също е в областта на химията на водно-солевите системи: синтез и структура на двойни соли на глицина (2 публикации); кинетиката на кристализация на многоразтворими соли (1 публикация); спонтанно разлагането на натриеви сулфат и селенат хидрат (1 публикация), Изключение правят 3 публикации, в които са изучени възможностите за рециклирането на металургична шлака. Последните изследвания са проведени в рамките на научен проект с ръководител и базова организация друг институт на БАН, но в приложената авторска справка кандидатката коректно е посочила само нейните лични приноси по тематиката. Характерно за всички тези изследвания на доц. Рабаджиева е стремежът ѝ за изясняване на връзката между състава, структурата и свойствата при изучаваните системи.

### **Основни научни приноси в публикациите от хабилитационния труд**

По метода на Питцер за йонното взаимодействие са термодинамично моделирани стабилните и метастабилните фазови равновесия в карбонатни системи от морски тип и са определени полетата на кристализация на образуващите се прости и двойни соли. Установено е, че поради кинетични фактори  $MgCO_3 \cdot 3H_2O$  кристализира като метастабилна фаза, което е потвърдено и експериментално. Разработена е нискоенергийна технология за получаване на едрокристален  $MgCO_3 \cdot 3H_2O$  с фармакопейна чистота и добри филтрувални характеристики от отпадни луги от морския солодобив.

Утаяването и трансформациите на калциеви фосфати в среда от симулирани тъканни течности са термодинамично моделирани по метода на йонната асоциация. Установено е, че хидроксиапатитът  $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$  има най-висока термодинамична стабилност и са прогнозирани условията за метастабилна кристализация на

$\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  и на аморфен калциев фосфат  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_3(\text{am})$ . Експериментално са получени аморфни калциеви фосфати, които след престой в симулирана тъканна течност рекристализират в слабокристален костоподобен карбонат апатит. Показано е, че в биомиметична реакционна среда могат се получат аморфни калциеви фосфати съдържащи йонни включения близки до тези на костната тъкан, както и с повишено съдържание на биологично активните елементи Mg и Zn.

Разработен е нов комбиниран модел за изчисляване на неорганичните химични форми на елементите в солени и хиперсолени води, съгласно който поведението на макро- и микрокомпонентите се описва посредством моделите на Питцер и на йонната асоциация, съответно. Комбинираният модел е приложен към природни води с широк диапазон на соленост и е показано, че във води с висока йонна сила той позволява точно изчисляване на неорганичните химични форми на елементите в сравнение с модела на йонната асоциация.

Показана е възможността за оценка на екологичното състояние на води и почви на базата на аналитични данни за тоталното съдържание на елементите и данните от термодинамичните изчисления на разпределението на неорганичните и органични химични форми на преходните метали Al, Fe, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Cd и Pb. Чрез подходящи модели са оценени неорганичното комплексообразуване и комплексообразуването с органични киселини, както и възможността за самоочистване на водните разтвори чрез протичане на процеси на спонтанната кристализация. Изтъкнато е влиянието на химичната форма на елементите върху тяхната фитоаккумуляция.

### **Основни научни приноси в публикациите извън хабилитационния труд**

Оптимизиран е методът за синтез на калциево-фосфатни биоматериали. Показано е, че присъствието на биоразградими полимерни матрици като модификатори на биомиметична реакционна среда е ефективен способ за повишение на дисперността на калциевите фосфати. Разработен е метод за получаване на финодисперсни йонно-модифицирани калциево-фосфатни прахове и композити на тяхната основа и е доказана тяхната биосъвместимост.

Получени са нови аналитични данни за изменение на концентрацията на преходни метали във води, почви и растителност от агро-индустриални зони. Показана е повисоката обменна мобилност на преходнометалните йони в почвите в сравнение с водоразтворимата им мобилност. Изчислени са формите на разпределение на преходните метали във водно-почвените разтвори и е установено, че растителността акумулира в най-голяма степен метал-органични комплекси. Определен е редът за предпочитанна фитоаккумуляция на различните комплексни форми.

Изследвано е влиянието на структурата на разтвора върху кинетиката на кристализация на многоразтворими магнезиеви соли. Установена е пряка корелация между стабилизирането на различни магнезиево-сулфатни асоциати в наситените им разтвори и скоростта на кристализация на съответните соли.

Получени са нови двойни соли на глицина с цинковия бромид и цинковия йодид като продукти от равновесна и неравновесна кристализация и е определена кристалната им структура.

Показано е влиянието на присъствието на влага върху механизма на спонтанното разлагане на метастабилните натриев сулфат и селенат седемхидрати.

Изследвано е взаимодействието на сложно-съставни силикати от металургична шлака с алкални разтвори. Получени са нови данни за окислението на медна пирометалургична шлака като първи етап от процеса за нейното оползотворяване и са установени протичащите структурни трансформации. Показано е влиянието между състава на окислената пирометалургична шлака и рН на гелообразуването.

### **Препоръки и лични впечатления от кандидатката**

Принципни критични забележки към представените материали нямам. Публикациите на кандидатката са колективни, но мултидисциплинарният характер на изследванията в областта на материалознанието и екологията налага привличането на учени с различни области на компетентност. Ролята на доцент Рабаджиева в тези изследвания и приносите ѝ са ясно очертани.

Познавам доц. Рабаджиева от постъпването ѝ в ИОНХ-БАН и съм свидетел на нейното научно развитие. Тя прави впечатление със задълбочените си професионални познания, отговорност, колегиалност и умения за работа в екип, което я прави желан партньор за съвместни научни изследвания.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Доцент д-р Диана Рабаджиева участва в конкурса с актив, който изпълнява изискванията за заемане на академичната длъжност „Професор“ в Института по обща и неорганична химия – БАН. Нейната научна тематика е добре очертана и актуална, а научните ѝ трудове съдържат голям обем нови резултати и обобщения със значими научни приноси. От представените материали проличава, че кандидатката е утвърден учен в областта на неорганичната химия, способен да планира и ръководи системни научни изследвания. Считаю, че изборът ѝ за „Професор“ ще допринесе за по-нататъшното развитие на научните изследвания в лаборатория „Солеви системи и природни ресурси“ в ИОНХ, за чиито нужди е обявен конкурсът.

Давам положителна оценка и убедено препоръчвам доцент д-р Диана Годорова Рабаджиева да заеме академичната длъжност „Професор“ по професионално направление 4.2. Химически науки и научна специалност „Неорганична химия“ в Института по обща и неорганична химия - БАН.

Рецензент:

проф. д-р Екатерина Жечева

19.09.2021