

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за ДОЦЕНТ
научна специалност 4.2. Химически науки (Физикохимия)
обявен в ДВ бр.65 от 23.07.2013г.
за нуждите на катедра „Физикохимия” на ХТМУ

Рецензент: доц. д-р инж. Росица Димитрова Манчева
катедра „Химия и биохимия”, МУ-Пловдив

Единствен кандидат в обявения конкурс е д-р инж. Ангелина Константинова Попова, доцент в катедра „Химия”, ТУ-София.

1. Биографични данни за кандидата, научни интереси и педагогическа дейност.

Биографични данни. Д-р Попова е родена на 12.05.1958г. в София.

Висшето си образование завършила през 1981г. в Химикотехнологичния и металургичен университет като инж. химик по специалността „Електрохимични производства и химични източници на ток”.

От 1981-1984г. работи като технолог в Център по заваряване и контрол. През 1984г. е назначена в катедра „Електрохимични производства и защита от корозия” като инженер-химик. Работи там до 1986г.

В периода 1986-1989г. е редовен докторант в катедра „Физикохимия” на ХТМУ. 1998г. успешно защитава дисертация на тема „Молекулна структура и инхибиторно действие на диазоли при корозия на Ст 3 в кисела среда” по научната специалност 02.10.15 „Химично съпротивление и защита от корозия”.

За периода 1989-1998г. работи като химик в катедра „Физикохимия”.

От 1998-2006 е главен асистент в същата катедра.

Следва смяна на нейната месторабота и тя преминава в ТУ-София. Преподава там като главен асистент от 2006-2008г.

Хабилитира се през 2008г. с научно звание „доцент” по научната специалност 01.05.00 „Химия”.

Научни интереси. Научните интереси на доц. Попова са в областта на физикохимията, електрохимията, корозия и защита от корозия.

Учебно - преподавателска дейност. Аудиторна заетост. Началото на преподавателската дейност на д-р Попова датира от 1999г. В катедра „Физикохимия” на ХТМУ за периода 1999-2006 тя е ангажирана с лабораторни и изчислителни упражнения по „Физикохимия” I и II част за студенти (II и III курс) редовно и задочно обучение. Средното й годишно натоварване е 400 часа.

Като редовен главен асистент е ръководила упражнения и по дисциплината „Химия” в ТУ-София през зимния семестър на 2006г.

Започва да чете лекции по „Физикохимия” (23 часа) на студенти задочно обучение, летен семестър на 2005/2006г. в ХТМУ.

От ТУ-София са възлагани лекционни курсове по „Химия” за периода 2007-2013г., както следва:

- 2007/2008 – 30 часа (един поток студенти от МФ);
15 часа (един поток студенти от ФКСУ);
- 2008/2009 – 30 часа (един потока студенти от МФ);
30 часа (един поток студенти от МТФ);
15 часа (един поток студенти от ФЕТТ);
15 часа (един поток студенти от ФКСУ);
- 2009/2010 – 60 часа (два потока на студенти от факултет Машинно инженерство, енергетика, транспорт и авиация);
30 часа (два потока на студенти от факултет Комуникации, компютърна и електронна техника);
30 часа (един поток студенти от факултет Инженерен дизайн);
- 2010/2011 – 30 часа (един поток студенти от факултет ТФ);
30 часа (един поток студенти от факултет ЕМФ);
30 часа (един поток студенти от факултет ИД);
15 часа (един поток студенти от факултет ФЕТТ);
15 часа (един поток студенти от факултет ФТК);
- 2011/2012 – 30 часа (един поток от факултат ТФ);
30 часа (един поток от факултет ЕМФ);
30 часа (един поток от факултет ИД);
15 часа (един поток от факултет ФЕТТ);
- 2012/2013 – 30 часа (един поток студенти от факултет ТФ);
30 часа (един поток студенти от факултет МФ–ИД);
30 часа (един поток студенти от факултет ЕМФ);
30 часа (един поток студенти от факултет МТФ);

Общийят хорариум на прочетените лекционни курсове е 623 часа като от тях 345 часа са през последните три години.

2. Преглед на научните трудове на кандидата.

Д-р Попова участва в настоящият конкурс с 23 броя публикации, които са публикувани в:

- * международни списания с ИФ – 12броя;
- * публикации в национални списания – 9 броя, в т.ч. 2 броя в списания с ИФ;
- * доклади на международни форуми отпечатани в пълен текст в сборници, с издателство и редактор – 2 броя;
- * автореферат на защитена докторска дисертация;
- * постери и съобщения и доклади от научни конференции и симпозиуми (отпечатани като резюмета) – 9 броя;
- * участия в научни проекти – 5броя, финансиирани от НИС при ХТМУ;
- * учебни помагала – 2 броя;

В рецензираните 23 бр. публикации д-р Попова е самостоятелен автор в две от тях, на първо място е в тринадесет, в пет е втори автор, в две е трети и в една е на четвърто място.

Броят на публикациите в списания с импакт-фактор е 14 бр. Общий импакт-фактор на тези публикации е 18,022, а индивидуалният - 8,66.

Представената справка на цитиранията за придобиване на академичната длъжност „доцент“ съдържа 1009 цитата върху 24 статии. Доказателство за стойността на публикуваните научни резултати е тяхната висока цитируемост. Десет от трудовете са цитирани повече от десет пъти и то от чужди автори.

Прави силно впечатление, че публикация (B1) излязла през 2003г. в списание Corrosion Sci., е цитирана 415 пъти и от цялата база данни на Scopus в областта на корозионните инхибитори е на трето място в света. Следващата година (2004) в същото списание е публикувана още една статия (B3), която също предизвиква огромен интерес и до сега е цитирана 173 пъти.

Тематиката на представената научна продукция отговаря напълно на областта, в която е обявеният конкурс.

Към броят на публикациите, представени за участие в конкурса за придобиване на академичната длъжност „доцент“ по физикохимия не са включени трудовете използвани за присвояване на образователна и научна степен „доктор“.

3. Научноизследователска работа. Характеристика и оценка на научните приноси.

Кандидатката представя справка върху общо 23 публикации, от които 14 в международни и 9 в български специализирани издания.

Изследванията основно (21 публикации) са в областта на инхибиторните свойства на органични съединения при корозия на никовъглеродна стомана. Целта на проучванията е намиране на връзка между молекулната структура на органичните съединения и тяхното инхибиторно действие.

Две от публикациите са свързани с получаване и изследване на оксидни филми върху алуминий.

Условно публикациите са групирани в раздели както следва:

1. Обзори.
2. Инхибитори в неутрална среда.
3. Инхибитори в кисела среда.
4. Квантовохимични методи. Йонизационен потенциал.
5. Адсорбция.
6. Кинетика.
7. Оксидни слоеве върху алуминий.

Обзори (според списъка на публикациите C1)

В обзора се търси връзка между природата на инхибитора и защитната му способност при корозия на стомана и желязо в неутрална среда. Обхваща последните двадесет години. Направен е преглед на органичните съединения и те са групирани според състава им така: азот-съдържащи, кислород-съдържащи, сяра-съдържащи и др. За всяка група са коментирани структурните особености – дължина на въглеродната верига, разклоненост, степен на насыщеност, вид на функционалните групи и др.

Обзорът дава насоченост на следващите изследвания в научно-изследователската работа на д-р Попова.

Инхибитори в неутрална среда (публикации С2, С3)

Изследвани са най-важните фактори, от които зависи скоростта на корозия – времето за престой на образците в корозионно действащата среда, температурата на средата, предварителната подготовка на образците, концентрацията на корозионният агент, фоновият електролит и инхибитора.

Чрез гравиметричен метод за период от 20 дни е проучвано влиянието на времето за експозиция на нисковъглеродни образци в среда на 0,5M Na_2SO_4 и амини като инхибитори. Изяснена е ролята на предварителната подготовка (механично полиране и химично байцване). За първите 6 дни корозионният процес има нестационарен характер, след което средната скорост се установява постоянна до края на експеримента. Налага се изводът, че предварителната подготовка влияе върху скоростта само в началото на експеримента, затова тя е изключена като кинетичен параметър и байцването е посочено за подходяща и достатъчна технология при предварителната подготовка на образците.

При ниска концентрация на инхибитора зависимостта *скорост на корозия/време* има същият ход като във фоновия електролит ($0,5\text{M Na}_2\text{SO}_4$). Високата концентрация на инхибитора гарантира практически постоянна скорост на корозия за целия период на изследването. Препоръчва се оценката за скоростта на корозия в присъствие на конкретен инхибитор да се извърши за период на експозиция 10 дни, когато тя вече е стационарна, а предварителната подготовка не оказва влияние върху хода на процеса (Публикация С 2).

В публикация С3 са изследвани инхибитори от групата на алифатните амиini. Доказва се, че най-добри защитни свойства има етилендиамина. Отново се затвърждава изводът, че скоростта на корозия зависи от концентрацията на инхибитора и времето на експозиция. В условия на сравнение на инхибиторите е задължително да се стационира корозионният процес.

Инхибитори в кисела среда (публикации В 2-5, 9, 11-16, 18, 19)

Чрез гравиметрични и потенциодинамични методи са изследвани инхибиторните свойства на производни на бензимидазола при корозия на нисковъглеродна стомана в 1M HCl . Молекулната структура на бензимидазола е променяна чрез въвеждане на различни функционални групи. Установено е, че най-подходящото време на експозиция е 24 часа.

Експерименталните данни следват изотермата на Фрумкин. Изчислени са стойностите на свободната енергия на Гибс (ΔG_{ads}), адсорбционния коефициент B и константата a .

Зависимостта на защитните свойства от молекулната структура на изследваните съединения е коментирана от гледна точка на електронната и на химичната структура. Влиянието на химичната се проявява в липса на ясно изразена корелация между инхибиторния ефект и защитните свойства. Предполага се, че има и друга освен молекулната форма на адсорбция (катионна форма вследствие на протониране).

Влиянието на електронната структура се проявява в по-ясно изразена зависимост между инхибиторния ефект и площта на молекулите в сравнение с йонизацияния потенциал (Публикации В2, В3).

Чрез разнообразие от експериментални методи (импедансен, метод на поляризационните криви, гравиметричен метод и др.) е изследвано влиянието на температурата върху защитните свойства на производните на бензимидазола. Приносът на теоретичните аспекти са предложените структурни модели на междуфазовата граница в осъществие и в присъствие на инхибитори. По уравнението на Арениус е намерена стойността на привидната E_a и предекспоненциалния множител λ . Изказано е мнение, че стойността на E_a не може да е критерий за определяне природата на адсорбционния процес. По-ниската стойност на E_a в присъствие на 1-бензилбензимидазол в сравнение с тази в среда на 1M HCl се обяснява с наличие на компенсационен ефект.

За изясняване вида на адсорбцията, изследванията са разширени в посока температура и корозионна среда. Установено е, че само 2- меркаптобензимидазол запазва високи стойности на защитния си ефект в 1M HCl, 1M H₂SO₄ и в 1M H₂SO₄+ 10⁻⁴ M KI при 60⁰C. Предполага се, че той химически се адсорбира за разлика от останалите съединения, които губят защитните си свойства при 60⁰C в 1M H₂SO₄. Направено е заключение, че те се адсорбират като катиони в протонираната си форма (Публикация В1).

Очертани са областите за практическото приложение на инхибитора бензимидазол и 9 негови производни в к.HCl. Изчислени са стойностите на защитният ефект IE% и коефициента на защита γ . Посочени са най-подходящите инхибитори при киселинно байцване с IE% над 96% в 5M HCl.

Безспорен теоретичен и практически принос е изследването на защитните свойства на 1,2-дibenзилбензимидазол в 5M HCl. Определен е инхибиторният му ефект-99,3% и способността му да намалява 148,4 пъти скоростта на корозия в 10⁻⁴M HCl. Това е най-доброят инхибитор от групата, не е изследван преди това от други автори и неговото откриване е подчертан принос в областта на инхибиторите (Публикация В 14).

Азоли (публикации B7,9,10,13). Избрани са съединения с почти еднаква площ на молекулите-индол, бензимидазол,ベンзотиазол иベンゾтиадиазол. Направено е предположение, че ако химичната им структура е почти еднаква, разликата в инхибиторните им свойства ще се определя от влиянието на електронната структура.

Намерено е, че най-доброят инхибитор на корозията е индолът, следван отベンзотиазолът иベンзотриазолът. Съединението с най-много неподелени електронни двойки в молекулата-ベンзотиадиазолът се оказва стимулатор на корозионния процес. Това негово поведение се обяснява с преминаване от хиноидна в ароматна структура, чрез присъединяване на водород в кисела среда.

Доказана е частична корелация между стойностите на инхибиторния ефект, броя на неподелените електронни двойки и енергията на HOMO и LUMO. Предполага се, че причина за липса на пълна корелация може да е протонирането в кисела среда.

Чрез импедансни изследвания е установено, че процесите на фазовата граница никовъглеродна стомана / 1M HCl + инхибитор от групата на азолите, но с ниски концентрации, се описват с пристрастна еквивалентна схема с една времеконстанта. Ако концентрациите на инхибиторите са високи, тогава се предлага друга еквивалентна схема, съдържаща две времеконстанти. Изчислени са стойностите на поляризационното съпротивление получено чрез променливотоковия импедансен метод и чрез независимия правотоков метод (на поляризационното съпротивление). Доказано е много добро съвпадение.

След обобщаване на тези данни съединенията са подредени в ред на инхибиторна активност, който съвпада с друг, намерен чрез гравиметрични и потенциодинамични методи (Публикации В 7, В 13).

Изследван е ефектът на температурата в среди на 1M HCl и 1M H₂SO₄ в присъствие на азоли при 20°C и 60°C. В 1M HCl бензотриазолът и бензотиазолът увеличават защитния си ефект. При 60°C в 1M H₂SO₄ те показват висок защитен ефект, сравним с този в солна киселина, аベンзимида золът и индолът губят защитните си свойства. Този факт се приема за достатъчно основание да се предположи, че по-вероятният механизъм за адсорбция върху металната повърхност на бензотриазола и бензотиазола е хемисорбция на молекулната им форма. За индол иベンзимида зол се предполага електростатична адсорбция.

Кватернерни амониеви бромиди (публикации В 11, 12, С 7, 9). Синтезирани са различни хетероциклически съединения (пиридин, хинолин, бензотиазол) и за първи път са изследвани като инхибитори на корозията на нисковъглеродна стомана в среди на 1M HCl и 1M H₂SO₄. Като най-добър инхибитор се сочи 3-пропилпиридино -2-метилбензотиазолиев дигромид. С увеличаване на температурата всички съединения увеличават защитния си ефект. Добрите инхибиторни свойства на изследваните съединения се свързват с електростатична адсорбция на катиони във външната равнина на Хелмхолц в двойния електричен слой, причиняваща блокиращ и енергетичен ефект.

Разликата в защитните им свойства се обяснява с различната площ на съдържащия се в молекулите хетероцикъл (публикации В 11, С 9).

Чрез методите на импедансната спектроскопия е намерено, че при високи концентрации и ниски температури спектърът се описва със структурен модел на междуфазовата граница съдържащ две времеконстанти свързани със зареждането на двойният електричен слой и адсорбцията. При по-ниски концентрации адсорбционната константа намалява и импедансният спектър добре се описва с прост структурен модел с една времеконстанта. Подобна е картина и при високи температури - корозионният процес се ускорява, но адсорбционното равновесие се измества към десорбция и моделът с двете времеконстанти дегенерира в една (публикации В 12, С 7).

Квантовохимични методи и йонизационен потенциал (публикации С 4, 6, 8).

Потърсена е връзка между инхибиторният ефект и два параметъра на молекулната структура (площта на адсорбираните молекули и тяхната електронната структура) на 10 вида амиини.

Йонизационният потенциал е изчислен като е използван разширеният полуимперичен квантов метод на Хюкел, а площта на молекулите е определена със софтуерния продукт Hyperchem.

Установено е, че инхибиторните ефекти на тези съединения се стремят към нарастване с намаляване на йонизационният потенциал и увеличаване на молекулната площ.

Адсорбция (публикации В 1, С 7, В 6).

Изследвана е адсорбцията наベンзимида зол и негови производни върху нисковъглеродна стомана в кисела среда по метода на Решетников и Плетнев. Достойнството на работите е, че авторът предлага детайлно анализиране на кинетичните адсорбционни данни, отчитащи както блокирането така и забавянето на скоростта на корозия в резултат на изменение на адсорбционният потенциал. Данните показват, че при ниски концентрацииベンзимида золът блокира преди всичко

повърхността на енергетически най-изгодните места, а при високи концентрации постепенно енергетичният ефект (ψ -ефект) става определящ.

Типът на адсорбционната изотерма, нееднородността на металната повърхност и преобладаващото действие на ψ и θ -ефектите са определени за всяко от изследваните вещества.

Предложен е и метод за намиране на константите и степента на запълване на изотермата на Фрумкин.

Статистическият анализ показва, че избраната изотерма на Фрумкин добре описва инхибиторното действие на изследваните съединения.

***Кинетика на корозията* (публикация В6).**

Изследването е в рамките на общата тематика на научните трудове на д-р Попова. Представена е информация за кинетиката на корозионния процес на никсово-глеродна стомана в солна киселина (1М и 2М) в присъствие и отсъствие на инхибитори. За интервал от време 30 часа е намерено, че кинетиката на процеса без инхибитор се описва с експоненциално кинетично уравнение на самоускоряваща се реакция, а в присъствие на инхибитор кинетиката следва зависимостите на кинетично уравнение на реакция от нулев порядък. С времето скоростта на корозия нараства, което се обяснява с увеличаване на броя на микрокатодите в процеса на разтваряне на металната повърхност.

***Анодни оксидни слоеве върху алуминий* (публикации В5,8).**

Кинетиката на реанодиране (запълване на порите) на анодните филми върху алуминий е изследвана в боратен електролит. Проверена е възможността за прилагане на уравнението на Günterschulze-Betz I и са определени константите в това уравнение.

Чрез импедансна спектроскопия е получена информация за някои диелектрични характеристики на тези филми.

4. Оценка на учебните помагала.

Д-р Попова е съавтор в две учебни помагала:

1. А.Цветанова, С.Калчева, М.Мачкова, А.Попова, И.Каназирски, „Практикум по физикохимия и колоидна химия”, изд. На ХТМУ, София, 2005г., 166с.

В учебното пособие се разглеждат графичните методи за представяне и обработка на експерименталните данни и някои теми от основни раздели на физикохимията-химична термодинамика, строеж и свойства на молекулите, електрохимия, дисперсни системи и химична кинетика. Всяка от темите се съпровожда със съответните упражнения-28 броя, ISBN 954-8954-64-8.

2. А. Попова, Р.Бошнакова, Й.Марчева, Л.Пинdeva, Б.Цанева, „Ръководство за лабораторни упражнения по химия, Изд. на ТУ-София, 2009г., 80 с, ISBN 978-954-438-785-9.

Ръководството е съобразено с учебния план по химия на ТУ-София. Съдържа инструкции за работа в часовете за лабораторни упражнения по химия и описание на използваната стъклария и апаратура. Включва теми от следните области на химията - електролитна дисоциация, окислително-редукционни процеси, химични свойства на металите, химични източници на ток, корозия и защита от корозия, полимери и галванизиране на диелектици. Включени са и 8 бр. упражнения.

Д-р А.Попова като съавтор с доц. Бетова разработва нова учебна програма и нови упражнения по химия за специалността „Инженерна физика”.

5. Допълнителни показатели от дейността на кандидата по чл.42 ал.2.

Освен четенето на лекционни курсове и разработването на учебни програми, което беше подробно коментирано в т.1, за периода 2004-2012 кандидатката е участвала и в изследователската работа по пет вътреуниверситетски проекта на НИС при ХТМУ. Общата идея в тях е изследвания в областта на корозията и по конкретно на инхибиторните свойства на различни съединения в конкретни среди и при различни условия.

От 2009г. д-р Попова е заместник-ръководител на кат. „Химия” в ТУ-София.

Високият професионализъм и компетентност на кандидатката се проявява и чрез направените от нея над 56 рецензии за периода 2003-2013г. Мнението ѝ е потърсено от редица водещи международни списания като J. Electrochemical Society, Corrosion Science, Electrochimica Acta, J. Applied Electrochemistry и т.н.

Тя е била и рецензент на дисертация за присъждане на научна степен „доктор”, а също така и рецензент в конкурс за академична длъжност „доцент”.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Направеният преглед на преподавателската и научна дейност на д-р Ангелина Попова показва категорично, че тя е изграден университетски преподавател и учен-изследовател в областта на физикохимията, електрохимията и защитата на металите от корозия. Има собствена научна тематика и е способна да организира и провежда самостоятелно задълбочени изследвания на високо научно ниво, като използва разнообразни и съвременни експериментални методи.

Публикационната активност на кандидатката илюстрира едно хармонично и успешно професионално развитие, което започва с разработването на дисертационната й работа в областта на инхибитори на корозията и през годините тази тематика се запазва като основна, продължавайки в научно-изследователската дейност на д-р Попова. Наукометричните показатели заедно с изследователската и преподавателска дейност на кандидатката са повече от достатъчни и покриват напълно изискванията за заемане на длъжността „доцент” посочени в Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в ХТМУ (чл.41, ал.3).

Преподавателската дейност на Ангелина Попова показва, че тя е способна да поема голямо учебно натоварване и има опит в преподаването на две дисциплини-химия и физикохимия. В полза на кандидатката е и факта, че тя вече е удостоена със званието „доцент” по научната специалност „химия” от СНС по физикохимия и ВАК през 2008г.

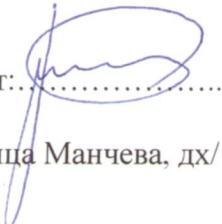
Според мен, с оглед бъдещата работа и развитие на д-р Попова има значение и обстоятелството, че мястото на което са организирани и проведени преобладаващата част от експериментите е кат. Физикохимия на ХТМУ“. Това предполага че тя познава атмосферата и традициите на катедрата и бързо и безпроблемно ще се включи в нейната дейност.

След всичко това си позволявам да изкажа своето положително становище и да препоръчам на членовете на уважаваното Научно жури при ХТМУ да гласува и присъди на доц. инж. д-р Ангелина Константинова Попова академичната длъжност „доцент” по научната специалност 4.2. Химически науки (Физикохимия) и да предложи

на Съвета на Департамента по химични науки също да подкрепи заемането на тази академична длъжност от кандидатката.

10.11.2013

Пловдив

Рецензент: 

/ доц. инж. д-р Росица Манчева, дх/