Авторска справка

за приносния характер на научните трудове на

доц. д-р Христо Господинов Колев

представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „**професор**”,

по професионално направление **4.2 „Химически науки**”, научна специалност „**Химия на твърдото тяло**”,

за нуждите на лаборатория „**Дизайн и охарактеризиране на каталитични материали**” – **ИК-БАН**

Справка за брой научни публикации по категории след хабилитиране (2014 - 2025 г.), цитати и индекс на Хирш.

Брой публикации по категория	
Q1.1 (оглавява ранглистата)	4
Q1	32
Q2	21
Q3	17
Q4	16
Само с SJR	1
Доклади на конференции/ Proceedings	15
Други вкл. Книги и глави в книги	7
Общо след хабилитиране	113
Общ брой за кандидата	139
Научни публикации – хабилитационен труд	10
Цитирания	
Общ брой цитати	1237
Цитати след хабилитиране на всички публикации	1153
Цитати на публикациите, използвани за конкурса	360
Индекс на Хирш	
h-index	18

Общият брой публикации на кандидата е 139, от които 113 след хабилитиране и заема на академичната длъжност „доцент“. 106 от общия брой работи на кандидата са публикувани в реферирани и индексирани списания, включени в бази данни с научна информация (Web of Science и/или Scopus). Общият брой на забелязаните цитати (без автоцитати на всички автори) е 1237, от които 1153 след хабилитиране и заема на академичната длъжност „доцент“. Цитиранията на работите, включени в конкурса, по Web of Science и/или Scopus са 360. Индексът по Хирш (H) на кандидата въз основа на всички публикации, включени в бази

данни: Web of Science и Scopus (без автоцитати на всички автори) е 18. Общият брой точки с които кандидатът участва в конкурса за заемане на академичната длъжност „професор“ са 4226 точки.

Кратка справка за научни приноси включени в група показатели „Г“

Основната част от приносите са фокусирани върху систематичното приложение на рентгеновата фотоелектронна спектроскопия (РФС/XPS) като водещ инструмент за анализ на повърхностната химия, валентните състояния, дефектната структура и електронните свойства на оксидни, магнитни и хибридни материали с приложение в три ключови направления, всяко от които отразява ясно изразен научен принос: (i) материали за съхранение и преобразуване на енергия, (ii) наноматериали за наномедицински приложения, и (iii) луминисцентни оксидни и MOF-базирани системи. Основната цел е да се установят ясни зависимости „структура – дефекти – свойства – функция“ и да се разкрият механизмите, определящи работоспособността на материалите в реални приложения.

В трите направления, представените резултати демонстрират интегриран подход, включващ комбиниране на РФС с широк набор от съвременни експериментални техники—XRPD, SEM/TEM, EDX, AFM/CM, IR/FTIR, Raman, EPR, SQUID, ICP-AES, TG/DSC, N_2-физисорбция, термопрограмируеми процеси (TPR/TPO), електрохимична импедансна спектроскопия, циклична и пулсова волтаметрия—както и теоретични интерпретации на редокс процеси, кислородна дефектност и повърхностни енергийни нива. Този интегриран подход позволява комплексно разбиране на структурата и функционалността на изследваните материали и очертава ясни механистични зависимости, които определят тяхното приложение в енергетиката, биомедицината и оптоелектрониката.

По-долу са изброени основните научни приноси на включените в конкурса публикации, които са групирани в три направления. Номерацията е според представения списък на публикациите приложение в папка „11_Отпечатъци на публикациите, включени в конкурса“, папка „Публикации в група показатели Г“.

I. Приложение на РФС при изследване на оксидни и хибридни материали за съхранение и преобразуване на енергия

(*публикации G1, G6 и G9*)

В това направление са обединени изследвания, посветени на оксидни материали за твърдооксидни горивни клетки и електродни материали за литиево-йонни батерии. Общата концепция е да се проследи връзката между кристалната и електронната структура, кислородните дефекти и йонно-електронния транспорт, като рентгеновата фотоелектронна спектроскопия (РФС/XPS) се използва като основен инструмент за повърхностен анализ.

В *G1* са изследвани $La_{1-x}Ca_xAlO_{3-\delta}$ перовскитни керамики, получени по механохимичен път, като чрез РФС е анализирана химичната околност на елементите и кислородната дефектност в зависимост от степента на Ca-заместване. Комбинирането на РФС с електрохимични измервания показва как промяната в съотношението La^{3+}/Ca^{2+} и кислородните ваканции води до оптимизация на смесената йонно-електронна проводимост и преноса на кислородни йони. Показано е, че при умерено съдържание на Ca^{2+} се достига максимална парциална кислородно-йонна проводимост, а при по-ниски температури електрическите свойства се доминират от приноса на границите на зърната.

Работата в *G6* разширява този подход към $Ce_{1-x}Gd_xO_{2-x/2}$ твърди разтвори, получени по „зелена“ алгинат-медиирана йонообменна схема. РФС е използвана за установяване на съотношението Ce^{3+}/Ce^{4+} и ефекта на Gd-дотирането върху електронната структура и кислородната дефектност. Съпоставянето на XRD, IR, SEM и РФС позволява да се проследи еволюцията на структурата от прахове към синтеровани керамики и да се изведе как термичната обработка и съдържанието на Gd влияят върху стабилността на флуоритната фаза и потенциала на тези материали като електролити за IT-SOFC и като каталитично активни оксиди.

В *G9* фокусът е върху високоентропийни шпинелни оксиди и литиирани оксихалогениди (HEOFe, LiHEOFeF, LiHEOFeCl) като анодни материали за литиево-йонни батерии. Макар основният структурен анализ да се опира на XRD и Mössbauer спектроскопия, РФС има ключова роля за потвърждаване на химичния състав и стабилността на повърхностните Fe^{3+} центрове при въвеждане на Li и F/Cl и при наличие на кислородни дефекти. Чрез съпоставяне на повърхностната химия (РФС), наноструктурата и електрохимичните характеристики (цикловолтаметрия, галваностатични измервания, EIS) се формулира ясна връзка между размер на частиците, зарядопренос и капацитет, като се показва, че най-добрите параметри се получават за оксихлорида с най-фин размер.

В обобщение, публикациите *G1*, *G6* и *G9* демонстрират как XPS може да бъде използвана за целенасочено проектиране и оптимизация на оксидни материали за съхранение и преобразуване на енергия – от определяне на валентни състояния и кислородни ваканции до корелация с йонна проводимост и заряден капацитет.

II. Приложение на РФС при изследване на редкоземни оксиди с приложение в луминесценцията

(*публикации G2, G3, G4 и G5*)

Второто направление обхваща изследвания на лантанид-съдържащи оксидни и MOF-базирани материали с луминесцентни свойства. Основният принос е в детайлното повърхностно охарактеризиране чрез РФС и в корелацията между валентни състояния, координационна среда и оптичен отклик.

В *G2* са изследвани тънки филми от $GdNbO_4$ и $GdTaO_4$, при които РФС установява стабилни Gd^{3+} и Nb^{5+}/Ta^{5+} състояния и количествено определя промяната в Gd-съдържанието от прахообразни прекурсори към филми. Чрез сравнението на повърхностния състав (Gd/Nb/O и Gd/Ta/O) с екситационните и емисионните спектри се показва как зарядно-трансферните преходи към Nb^{5+}/Ta^{5+} и вътрешноконфигурационните 4f–4f преходи на Gd^{3+} определят UV емисията и потенциала за сензори и дисплейни устройства.

В *G3* е разгърнат подходът към изоструктурни Eu/Gd/Tb MOF тънки филми на базата на BTC лиганд, като РФС допълва структурните методи за потвърждаване на координационната среда на Eu^{3+}, Gd^{3+} и Tb^{3+}. Чрез вариране на съотношението между лантанидите и на синтетичните условия (вкл. „зелен“ модулативен метод) се реализират прозрачни филми с контролиран наноморфологичен строеж и двуцветен емисионен профил, управляван от дължината на вълната на възбуждане.

G4 е фокусирана върху $SmNbO_4$ и $SmTaO_4$ прекурсори, където чрез РФС изследвания на основното ядрено ново за първи път се разграничава съвместно присъствие на Sm^{2+} и Sm^{3+} и се въвеждат параметри Δ(O–Nb) и Δ(O–Ta) за описване на средната Nb–O и Ta–O връзка. Показано е, че доминиращите Sm^{3+} състояния и специфичната координация създават предпоставки за приложение на тези материали като нанофосфори в осветителни и дисплейни технологии.

В *G5* се проследява трансформацията на аморфен Tb-MOF в TbO_x тънки филми върху $Pt/SiO_2/Si$ подложка. РФС потвърждава съвместното присъствие на Tb^{3+} и Tb^{4+} на повърхността и, в комбинация с XRD и TEM, позволява да се изгради модел за образуване на фази тип cF-TbO_x, c-Tb_4O_7 и c-Tb_2O_3. Чрез допълнителни топографски изследвания (CM, AFM) се демонстрира как преходът от аморфен MOF към кристален TbO_x филм променя морфологията, порьозността и потенциала за оптични приложения.

В това направление РФС е използвана не просто за „идентификация на елементи“, а като инструмент за фино разграничаване на валентни състояния (Sm^{2+}/Sm^{3+}, Tb^{3+}/Tb^{4+}, Gd^{3+}), за въвеждане на енергийни критерии за Nb–O/Ta–O връзки и за обвързване на тези характеристики с луминесцентния отклик и функционалността на материалите в оптични устройства.

III. Приложение на РФС при изследване на наноматериали за наномедицината

(*публикации G7, G8 и G10*)

Второто направление обединява разработки на магнитни наночастици и функционални наноматериали с потенциал за приложение в наномедицината – магнитна хипертермия, MRI контрастни агенти и електрохимични биосензори. Общият знаменател е използването на РФС за определяне на повърхностната химия и активни центрове, които управляват както магнитния, така и каталитичния и електрохимичния отговор.

В *G7* са изследвани Co-субституирани магнетитни наночастици, оптимизирани за магнитна хипертермия. РФС анализът позволява да се разграничи съотношението Fe^{2+}/Fe^{3+} и Co^{2+}/Co^{3+} на повърхността и да се свърже с наблюдаваното увеличение на магнитокристалната анизотропия, намагнитването на насищане и специфичната поглъщателна мощност (SLP). Показано е, че избраният състав осигурява добър компромис между магнитни свойства, стабилност на колоидите (след покритие с лимонена и поли(акрилова) киселина) и потенциал за самонагряващ се хетерогенен катализ в условията на променливо магнитно поле.

Публикацията *G10* представя концептуална стъпка напред: ултра-ниско Gd^{3+}-дотиране на многокорови γ-Fe_2O_3 „наноцветя“ за комбинирано MRI/MHT (MHT Malignant Hypertension, MRI Magnetic resonance imaging) приложение. Чрез РФС се доказва възникването на дефекти – повишено съдържание на Fe^{2+} и некристален кислород при нарастваща концентрация на Gd^{3+}, което е интерпретирано като редокс дисбаланс и формиране на кислородни ваканции. Комбинацията от РФС, EPR и SQUID показва как тези дефекти водят до повишена магнитна анизотропия и оптимизиран MHT отговор, без загуба на суперпарамагнитно поведение. Паралелните MRI релаксометрични измервания демонстрират значително подобрение на r_1 и r_2, като за определени състави се постига оптимален r_2/r_1 баланс за dual-mode T_1/T_2 образна диагностика.

Публикацията *G8* разширява медицинския контекст към електрохимична диагностика: MOF-произведена наноцерий/g-C_3N_4 е използвана като електроден модификатор за чувствителен волтаметричен сензор за гуанин. РФС тук е ключов инструмент за определяне на степента на окисление на Ce, наличието на кислородни дефекти и взаимодействието между наноцерия и g-C_3N_4, които управляват електрокаталитичната активност и дифузионно-контролирания механизъм на окисление на гуанина. Получените нисък предел на откриване и добра селективност в реална матрица (урина) демонстрират потенциала на тези материали за биомедицински анализи.

Така, в *G7*, *G8* и *G10* РФС играе централна роля за рационалното проектиране на наноматериали за наномедицина – от медицински контрастни агенти и термотерапия до биоаналитични сензори – като позволява да се свържат дефекти, валентни състояния и повърхностни функционалности с терапевтична и диагностична (тераностична) ефективност.

Авторската справка представя систематичното приложение на рентгеновата фотоелектронна спектроскопия като водещ инструмент за изследване на повърхностната химия, валентните състояния и дефектната структура на оксидни, магнитни и хибридни материали. Този комплексен подход позволява установяване на устойчиви зависимости между структурата, функционалните свойства и реалното приложение на материалите в три ключови научни направления – съхранение и преобразуване на енергия, наномедицина и луминисценция.

Постиженията в областта на енергийните материали включват изясняване на ролята на кислородната дефектност, редокс поведението и катионните

заместители върху йонно-електронния транспорт и електрохимичната активност, като изследванията върху високоентропийни оксиди и литирани оксихалогениди показват как повърхностната химия определя стабилността, капацитета и механизмите на зареждане/разреждане в литиево-йонните системи. В наномедицината са постигнати значими резултати, свързани с повишаване ефективността на магнитната хипертермия, оптимизиране на MRI-контраста и разработване на електрохимични биосензори с висока чувствителност, като чрез РФС са разкрити механизмите на формиране на повърхностни дефекти, редокс състояния и координационни изменения, които управляват магнетизма, релаксивността и каталитичната активност на наночастиците. В областта на луминисцентните материали е извършен цялостен анализ на връзките между валентните състояния на редкоземните елементи, зарядно-трансферните преходи и оптичните свойства, като получените резултати разкриват ключови зависимости, определящи поведението на сензорни и оптични покрития, както и на MOF-базирани луминесцентни филми.

Обобщено, представените резултати демонстрират последователно научно развитие, насочено към установяване на механизми на повърхностна активация и дефектно инженерство в оксидни и хибридни системи, както и към създаване на функционални материали със значим потенциал за приложения в енергетиката, биомедицината и оптоелектрониката.

В останалите публикации, изброени в списък „8.2. Списък на публикации, изобретения, патенти и др. в група показатели Г“, в раздел „Допълнителни към хабилитационната и авторската справки“, основният ми научен принос е свързан с измерване и детайлно повърхностно охарактеризиране на изследваните материали чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия (РФС).

Получената информация за валентните състояния, химичната среда и концентрацията на елементите на повърхността предоставя съществена основа за интерпретация на структурните, електрохимичните, магнитните и функционалните свойства на изследваните образци.

Поради значителния брой на тези публикации и с цел запазване на фокуса и обема на авторската справка, те не са разглеждани поотделно, но са отчетени при покриване на минималните национални и институционални изисквания.

Кратки научни приноси

- **Енергийни материали:** Определена е ролята на кислородните дефекти, редокс състоянията и катионните заместители върху йонно-електронния транспорт и стабилността на високоентропийни оксиди и литирани оксихалогениди, водещо до оптимизирани механизми на зареждане/разреждане в Li-йонни системи.
- **Наномедицина:** Разкрити са структурно-редокс механизми, които управляват магнитната анизотропия, релаксивността и хипертермичната ефективност на наночастици; разработени са

високочувствителни електрохимични биосензори чрез контрол на повърхностни дефекти и координационни състояния.

- **Луминисцентни материали:** Установени са зависимости между валентните състояния на редкоземните елементи, зарядно-трансферните преходи и емисионните свойства, определящи поведението на MOF-базирани филми, оксидни фосфори и оптични покрития.
- **Методологични приноси:** Демонстрирано е разширено приложение на РФС за анализ на валентни състояния, кислородна дефектност и повърхностна химия в съвременни функционални материали, включително MOF-рамки, високоентропийни оксиди, наномагнетити и редкоземни оксиди.