

Рецензия

по конкурс за заемане на академичната длъжност «доцент»
по научната специалност «минералогия и кристалография»
(вибрационна спектроскопия), обявен в «Държавен вестник»
брой 1/04.01.2013 г.

Кандидат: д-р Росица Христова Титоренкова, ИМК — БАН
Рецензент: проф. д-р г.н. Георги Николов Киров

Единственият кандидат в конкурса Росица Титоренкова е завършила специалност «геохимия» в Софийския Университет през 1989 г. От 1989 до 2010 г. работи в секция «Топографична минералогия», а от 2012 г. - в секция «Структурна минералогия» на ИМК — БАН като специалист. Между 2000 и 2006 г. разработва докторска дисертация: «Минераложки особености на циркони от палеозойски метакантони от Огражден планина» под ръководството на ст.н.с. Никола Зидаров. През 2011 и 2012 г. е на следдокторска специализация в Ямагучи университет, Япония. Завършила е краткосрочни курсове по вибрационна спектроскопия във Виенския университет (2004 и 2007г.) и по кристалография в Билбао, Испания (2009 г.). Водила е упражнения на специализанти по инфрачервена спектроскопия.

В конкурса д-р Титоренкова се представя с 33 публикувани работи, включително автореферата на дисертацията. Единадесет работи са в списания с импакт фактор, една е глава от книга, десет работи са в списания без импакт фактор и останалите са разширени (съдържателн) резюмета. Заглавието (27) е резюме на (18), като частта разработена от кандидатката се повтаря напълно и не се приема като публикация. Всички работи са на английски език. Всички работи са в съавторство със специалисти в разнообразни области. Забелязани са 53 положителни цитирания на 12 от представените работи и още 24 цитата на четири по-ранни работи. Представен е също списък на 29 участия в международни научни прояви и в 10 национални форуми. Както се вижда, представените работи и тяхното отражение в литературата покриват вътрешните изисквания на ИМК за участие в конкурс за доцент.

Разгледаните работи представят кандидатката като **изследовател** на широк кръг природни и изкуствени материали и на проблемите на техния генезис и еволюция. В практиката си е използвала разнообразни изследователски методи, като с течение на времето съсредоточава усилията си в приложение на инфрачервената и рамановата спектроскопия.

По отношение на обектите на изследване рецензираните работи се разделят на три групи: природни минерали и скали, калциево-фосфатни материали за стоматологични и медицински приложения и нови синтетични материали за различни приложения.

1. Природни минерали и скали.

1.1. Изследвания са циркони от метаморфни и магматични скали от Югозападна България като индикатор за условията на образуване на скалите (2, 9, 29,30, 31) и като минерал за определяне на абсолютната възраст на тези скали (7, 21, 30). Впечатляват работите върху метамиктизацията и възстановяването на цирконови микрокристали в зависимост от радиационната доза и последващата термична обработка (5, 7, 31). Тази група работи са отглас и продължение на докторската дисертация и са допълнителен принос за геологията на района. В методично отношение широко се прилагат морфологичен анализ по СЕМ-снимки, анализ на вътрешния строеж на кристалите по катодно-луминисцентни изображения, микросондови анализи, инфрачервена и раманова спектроскопия. В работа (5) за първи път за изследване на цирконови микрокристали е използвана ATR-микро-инфрачервена спектроскопия. Установено е, че този метод е много ефективен за изследване на структурното състояние на микрообекти.

1.2. Раманова и инфрачервена спектроскопия са приложени успешно за изясняване на фазовия състав на природен нсутит от Кремиковци (32) и на коломорфни зони от находище Хан Крум (Крумовградско) (18).

2. Калциево-фосфатни материали.

Тази тематика е представена в 11 работи, разработени в колективи с химици, медици, микробиолози. Изследвани са:

- Превръщанията на калциево-фосфатна аморфна утайка в «слабокристален» хидроксилапатит при зреене в симуирани тъканни течности с добавки на Mg^{2+} , Zn^{2+} , HCO_3^- , глицин и др. (3, 11, 20, 24, 25);
- Превръщането на получените продукти в хидроксилапатитно — трикалциево-фосфатна (витлокитова) двуфазна керамика при нагряване до $1200^\circ C$ в зависимост от температурата и примесните йони (3, 12, и др.);
- Влиянието на добавка от ZrO_2 за подобряване на механичните свойства на керамиката (22);
- Ефекта на високоенергийно сухо смилане на двуфазна калциево-фосфатна керамика (2);
- Кристализация на Са-фосфати в хидрогелна среда (26).

Приносите на кандидатката в тази група работи са свързани с инфрачервено-спектроскопското изследване на получените продукти. Тези изследвания допринасят за уточняване на фазовия състав на продуктите, състоянието на примесите, процесите на кристализация на аморфните продукти (при зреене и нагряване) и на аморфизация на кристалните (при смилане). Те са особено ценни в случаите, в които праховото рентгеново изследване е неефективно: включването на примеси (CO_3 , Mg и др.), състоянието на аморфните продукти, изменението на степента на кристалност и т.н. Ще ми се да е проследено поведението на CO_3 - и на ОН-групите при високотемпературните обработки, защото остава неясно наистина

ли хидроксепатитата запазва хидроксиден характер при толкова високи температури? Неясно остава защо е необходимо да се микронизира и аморфизира чрез смилане синтерован при 1200°C материал, който е в аморфно състояние и с нанометрични размери в началото на процеса (работа 2).

3. Материали с възможни приложения в оптоелектрониката и други високотехнологични области.

- Повечето от публикациите от тази серия са изработени в сътрудничество с физици и физикохимици от наши и чужди институти. Във всички случаи обектите са с неизследван до момента състав, като част от тях (1, 6, 9 и 10) са напълно нови, а останалите — съществено модифицирани съединения. Д-р Титоренкова участва в тези изследвания преди всичко като специалист по инфрачервена спектроскопия.

В повечето случаи, целевите свойства се появяват в резултат на заместване на определени йони с други и съответни изменения на скелетната или/и локалната симетрия в решетката. Например, в (4 и 13) се доказва заместване на 3Si^{4+} от ($\text{Se}^{6+} + 2\text{Fe}^{3+}$) в $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, което по инфрачервени и раманови данни, води до намаление на симетрията на заетите от Fe^{3+} позиции. Заместването на четири-валентния катион от ($\text{Mg}^{2+} + 2\text{P}^{5+}$) в същия тип съединение в статия (1) предизвиква изкривяване на Bi-O-скелета. В работа (10) рамановите спектри потвърждават присъствието на Mn^{3+}O_6 - и Mn^{4+}O_6 -октаедри при заместването на La^{3+} от Pb^{2+} . Рамановите спектри поучени в (15) са подложени в (14) на подробен теоретичен анализ и се показва, че в $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ заместването на Bi^{3+} от Co^{2+} води до поляризация на Co-октаедъра и анизотропия на кристалната структура, а заместването на Ge^{4+} от V^{4+} в тетраедрите има незначителен ефект. В работа (9) отново се използват възможностите на рамановата спектроскопия за установяване на координацията и отношенията на йоните в аморфни обекти.

- В работи (16) и (33) са изследвани различни катионни форми на GTS-тип титаносиликати, получени както пряко с хидротермален синтез, така и чрез йонен обмен на натриева форма: водородна и калиева в (16) и кобалтова и стронциева — в (33). Показаните инфрачервени и раманови спектри са много интересни, но интерпретацията им е недостатъчно пълна и на места противоречива. Обяснението на промените в скелетните вибрации с дефекти в скелета е правдоподобно само за получената в киселина H-форма.

- В работа (17) по прховорентенографски и инфрачервена-спектроскопски данни е създаден адекватен модел на кристалната структура на скварат- и хидрогенскварат-съдържащи хидроталкити.

В заключение: Д-р Титоранкова е съавтор в работи представляващи значителен принос в няколко научни направления, изразени в създаването и изследването на нови материали с перспективи за високотехнологични, медицински и екологични приложения, на нови приложения на изследователски методи и на изясняване на съществени проблеми от петроложки и регионално-геоложки интерес. Участието на кандидатката в работите се определя и разпознава по нейната методична насоченост. Тя се представя основно като спектроскопист в инфрачервената област. Прилага основните разновидности: FTIR-спектроскопия, раманова спектроскопия и ATR-микро-IR-спектроскопия. Владее и специфичните

методи за използване на минрала циркон при решаване на петрогенетични проблеми.

Работите на кандидатката са добре познати на научната общественост, за което свидетелства представения списък на забелязани цитати и представянето им на десетки международни и национални научни форуми. Участвала е в 13 научно-изследователски проекти.

Д-р Росица Титоренкова се представя на конкурса за доцент като изграден специалист с опит в разнообразни проекти, богат спектър от професионални умения и значителни научни постижения, публикувани в авторитетни международни издания и научни форуми. Това ми дава основания да препоръчам на Научното жури да и присъди званието «доцент» и да гласувам за нейното избиране.

София, 23.04.2013г.

Рецензент:

/Проф. Д-р г.н. Г. Киров/