

**Авторска справка за научните приноси в публикациите и цитиранията след
заемането на академичната длъжност „доцент” (ст. н. с. II ст.)**

Научни публикации, общ брой	113
Научни публикации, до хабилитиране	20
Научни публикации след хабилитиране	83
Научни публикации след хабилитиране по темата на конкурса	36
▪ В научни списания с импакт фактор	30
▪ В реферирани научни списания без импакт фактор	2
▪ В просидинги от конференции	2
▪ Монографии в колектив (резултати по проект NANOGENOTOX)	2
Цитати общо	253
Цитати след хабилитиране на всички публикации	188
Цитати след хабилитиране на публикациите по темата на конкурса	55
h-index	9
h-index Scopus	8
Решени нови структури с номера в кристалографските бази данни до 2010г.	117
ICSD	28
CSD	89
Участие в научни форуми и конференции след хабилитиране	26
Участие в проекти след хабилитиране	14 (8 ръководител)
Ръководство дипломат	1 защитил
Ръководство докторанти	2 в процес на разработване на докторски дисертации

Публикациите, които прилагам за рецензиране са свързани с изследване на кристалната структура и физикохимичните свойства на нови или модифицирани неорганични и метало-органични съединения, като смятам, че всички те имат непосредствено отношение към темата на конкурса „Структурна кристалография на неорганични и метало-органични съединения”. Част от публикуваните резултати са получени от изследванията проведени съвместно с групата на проф. Накаяма в Университета в Ямагучи, Япония, финансирани от Японското министерство на образованието, а останалите са извършени в ИМК (ЦЛМК) – БАН, като част от различни научно-изследователски проекти. Приносът ми в публикуваните резултати се състои основно в решаването на кристалните структури на изследваните съединения, синтезирани от доц. Владислав Костов (ИМК), колегите от групата на професор Марин Господинов (ИФТТ) и други колеги от ИМК, институтите на БАН и ФХФ-СУ. Гаранция за качеството на получените резултати са приетите в кристалографските бази структурни данни за изследваните съединения. Решаването и описването на дадена кристална структура е свързано с детайлно запознаване с определена група съединения или тип структура, което от своя страна провокира желанието за систематизация на известните данни и оценката им. Подобна оценка, направена от мен в част от публикациите смятам също за научен принос.

По-долу са изброени основните научни приноси на публикуваните резултати, като работите са групирани по вида на материалите и цел на изследването. Номерацията е според представения списък на публикациите.

1. *Определени са кристалните структури* и са изследвани физико-химичните свойства на нови цирконо-силикатни и модифицирани титано-силикатни материали - **10, 18, 24, 25, 27, 28, 29, 30, 34**.

Доказано е, че новото съединение $\text{Na}_2\text{ZrSi}_2\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$ има микропореста кристална структура, топологично сходна с осем съединения с обща химична формула $\text{A}_{2(3)}\text{MT}_2\text{O}_7$ (A=Na, K; M= Zr, Lu, Sc; T=Si, Ge) (**10**) и е единственото в групата, съдържащо водни молекули в порите. Определени са етапите на дехидратация и протониране на това съединение (**25**).

Доказано е, че цирконо-силикатния скелет на $\text{Na}_2\text{ZrSi}_2\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$ е стабилен до 800°C , след което съединението претърпява фазов преход, при който размерът на порите в новата структура е съществено по-малък и съответно забранява йонообменните свойства на материала (**18**).

Доказано е, че кристалната структура на $(\text{Na}_{3-x}\text{H}_{1+x} \text{ZrSi}_2\text{O}_8 \cdot y\text{H}_2\text{O})$ има слоист характер и е еднозначно определена като глазеритов тип и е доказано, че структурата е стабилна до 700°C , след което постепенно преминава в тип NASICON (**24, 29**).

Доказани са, позициите на Cs^+ , Ag^+ , Mg^{2+} , Mn^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} , Ba^{2+} при заместване на компенсиращите заряда на скелета йони на ETS-4 и е коментирано поведението на изследваните материали при температури от 150K (**27, 28, 30, 34**).

2. *Направени са кристало-химични характеристики* на нови и модифицирани съединения с наноразмерна големина на частиците – **8, 9, 21, 22, 23**, монографии 1 и 2

Предложен е модел на подреждане на структурните единици за група от съединения на циркония, с доказани интеркалиращи свойства, в които комплексния анион може да бъде $[\text{SiO}_4]$, $[\text{GeO}_4]$, $[\text{AsO}_4]$, $[\text{PO}_4]$ (**8**).

Показана е връзката между големината на размера на частиците, дефицита на титаниеви йони по повърхността им и абсорбционния капацитет на наноразмерни титано-силикати с обща формула $\text{A}_4\text{Ti}_4\text{Si}_3\text{O}_{16} \cdot n\text{H}_2\text{O}$ A=H, K, Na (**22, 23**)

Доказано е че, квадратната киселина може да бъде интеркалирана в слоисти двойни хидроксида, като едно- или дву-валентен анион, които повлияват по различен начин отделянето на междуслойните водни молекули при нагряване на материала. (**9**)

Показано е, че условията на синтез на наноразмерни частици от $\text{Al}_2(\text{WO}_4)_3$ трябва да бъдат оптимизирани с цел получаване на чиста фаза без странични замърсявания (**21**)

Изработени са стандартни протоколи за физико-химична характеристика на наночастици от титанов диоксид (TiO_2) и въглеродни нано-тръбички, като са изследвани представителни серии от търговски продукти (**M1, M2**). Изследванията са част от проект NANOGENOTOX, имащ за цел изследване токсичността на материали от нашия бит, съдържащи наночастици от TiO_2 , SiO_2 и въглеродни нанотръбички.

3. *Систематизирани са данни* за повече от 100 съединения с глазеритов тип структура. Предложена е модифицирана, по-информативна обща формула за този тип съединения (GTC – glasetite type compounds) - $X(0; 1) Y(0; 2) [M(ТО_4)_2]$ – **31**

4. *Доказани са кристалните структури* на кристали на неорганични оксидни материали с нелинейно-оптични, фероелектрични, феромагнитни свойства. Това са работи, в които съдействието ми е търсено главно за определяне на коректната пространствена група на симетрия и структурни параметри и промяната им при определени условия, с цел изясняване на наличието или отсъствието на дадени физични свойства и/или структурни дефекти – **3, 4, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 20, 26, 32, 33**.

Доказани са кристалните структури на чист $Bi_4Ge_3O_{12}$ и дотирани с Mn, Co, V, V+Co образци и е изследван ефекта на допантите върху деформацията на кристалната решетка и атомните параметри (**3, 15**)

Потвърдена е кристалната структура на монокристални образци от $Bi_{12}SiO_{20}$ дотиран с Os, Ru и Cu. Доказана е хомогенността и високото качество на дотираните с Os материали, нехомогенност на материала дотиран с Ru и значителна деформация на кристалната решетка на дотираните с Cu кристали (**4, 12**)

Доказани са кристалната структура на $La_{1-x}Pb_xMnO_{3+\delta}$ ($x=0.32-0.35$) и наличието на дефекти и двойникуване в големи кристали ($10 \times 12 \times 5 \text{ mm}^3$) от този материал (**11**)

Доказана е кристалната структура на дотирани с Pt и Pb двойни перовскити La_2CoMnO_6 . Структурата на получените кристали може да се разглежда като смес от неподредена орторомбична и подредена моноклинна фази (**13, 16**)

Доказана е кристалната структура и е уточнена пространствената група на симетрия на нов по състав материал $Pb_3Ni_{1.5}Mn_{5.5}O_{15}$ с фероелектрични свойства (**19**)

Доказани са кристалните структури на монокристални образци и е изследвана динамиката на кристалната решетка на $BaBiBO_4$ и $CaBi_2B_2O_7$ (**17**), $LiFe_5O_8$ (**20**), Sc_3CrO_6 (**26**), CuB_2O_4 (**32**) $CaMn_7O_{12}$ (**33**).

5. *Определени са кристалните структури* на нови органометални комплекси с цел определяне структурата на използваните органични лиганди, доказване или отричане на предварително зададени свойства и начин на координиране на лигандите – **2, 5, 6, 7, 14**

Синтезиран е и е решена кристалната структура на натриев водороден скварат монохидрат (**1**) и Pt(II) complex with 3-amino-5-methyl-5-phenylhydantoin (**5**)

Доказани са синтезът и полиетерен йонофорен антибиотик Na-монензин, както и начинът на комплексо-образуване с Mn, Co, Cu (**7, 14**)

Доказани са нови синтетични процедури за получаване на каликсарени и техни метални комплекси (**2, 6**)

София

20.05.2015

Росица Николова