

Авторска справка

за приносния характер на трудовете

извън хабилитационния труд (група от показатели Г, показател 7)

на гл. ас. д-р Албена Бъчварова – Неделчева,

представени за участие в конкурса

Общият брой публикации на кандидата е **61**, от които **28** са представени за участие в конкурса. По тематиката на хабилитационния труд (група от показатели В, **показател 4**) са включени **10** работи, а **18** засягат публикации извън хабилитационния труд (група от показатели Г, **показател 7**). Общият брой на забелязаните цитати (без автоцитирания) по **Scopus** е **242**. Общият брой на цитиранията участващи в конкурса върху всички публикации (групи В и Г, съответно **показатели 4 и 7**) са **206**. Индексът на Хирш (**Н**) на кандидата въз основа на **всички публикации** е **12**, по публикациите, с които участва в конкурса е **8**, а **съгласно Scopus** - **9**. Обобщените наукометрични показатели на кандидата са посочени в Приложение А.

Авторската справка за приносния характер на трудовете обхваща **18 публикации**, които са извън хабилитационния труд на кандидата, включени в **група от показатели Г, показател 7 от справката** за изпълнение на минималните и допълнителните изисквания. Всички работи в тази група от показатели са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (ISI Web of Science и/или Scopus).

Преобладаваща част от изследванията в тези публикации имат **фундаментален характер** и получените резултати разкриват възможностите за прилагане на зол-гелния синтез при получаването на съдържащи TiO_2 наноразмерни прахове с участието на класически (B_2O_3), междинен (ZnO) и нетрадиционни мрежообразуватели (TiO_2 , TeO_2 , SeO_2) в дву- и трикомпонентни системи (работи от 1 до 18). В **4 публикации** (3, 12, 14, 17) са застъпени изследвания относно антибактериални свойства на TiO_2 съдържащи нанопрахове, а други **4 работи** (3, 6, 9, 17) са посветени на фотокаталитични изследвания на синтезираните прахове, в което се изразява и **приложния характер** на проведените от кандидата изследвания.

В споменатите по-горе публикации, синтезите, фазовото (РФА) и структурно охарактеризиране (ИЧ, УВ-Вис и Рентгенова фотоелектронна спектроскопия) е извършено в ИОНХ – БАН. Фотокаталитичните тестове на синтезираните наноразмерни прахове спрямо моделните багрила Малахитово зелено и Реактивно черно 5 са проведени от колеги в сектор „Химия“ при Медицински Университет – Плевен под ръководството на проф. д-р Ангелина Стоянова. Антибактериалните тестове спрямо *E. coli* са извършени от

колеги в катедра „Микробиология, Вирусология и Медицинска Генетика“ при МУ - Плевен, под ръководството на проф. д-р Мария Средкова, както и колеги от катедра „Биотехнологии“ при ХТМУ – София, под ръководството на проф. д-р Нели Георгиева.

По - долу са изброени научните приноси на кандидата, като използваната номерация е според представения списък на публикациите в тази **група от показатели Г, показател 7**. Групирането на работите е направено въз основа на избора на система за изследване и конкретните цели на експеримента.

1. Прилагане на различни зол-гелни методи за получаване на наноразмерни композитни прахове в двукомпонентната система TiO_2 - ZnO (работи 1, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 12, 14).

Използвани са различни зол-гелни техники (хидролитичен, нехидролитичен и изгаряне в разтвор, т. нар. „combustion“ метод) за получаване на наноразмерни (~ 20 nm) прахове с различно съотношение на TiO_2 и ZnO . Установено е, че съществено влияние върху вида на крайния продукт (аморфен или кристален) оказва последователността на добавяне на компонентите в хода на зол-гелните реакции (работи 1, 4, 5, 6, 9). Доказано е, че присъствието на TiO_2 повишава термичната стабилност на аморфната фаза до ~ 500°C.

Синтезирана е кристалната фаза ZnTiO_3 , за която е установено, че притежава добри фотокаталитични свойства спрямо органичното багрило Малахитово зелено (работа 3, 7). За първи път е установено, че ZnTiO_3 проявява добри антибактериални свойства спрямо високи концентрации от бактерията *E. coli* (работа 3). Получени са композитни материали съдържащи ZnO , TiO_2 и природния зеолит клиноптилолит. Доказана е антибактериалната им активност в твърда среда (агар) спрямо два различни щама бактерии (*S. aureus* и *E. coli*) (работа 7).

Синтезирани са и нанокомпозитни материали с участието на SiO_2 , ZnO , TiO_2 и редуциран графенов оксид (RGO), като получените продукти показват добра антимикробна активност (работа 14). Предложена е схема за синтез на сложен композит съдържащ три активни фази Ag , TiO_2 и ZnO , за който е доказан мощен бактерициден ефект спрямо *E. coli* (работа 12).

2. Получаване на наноразмерни прахове TiO_2/ZnO чрез механохимично активиран твърдофазен синтез (работа 2).

Смес от две кристални фази ZnTiO_3 и Zn_2TiO_4 е получена при стайна температура чрез механохимично активиран твърдофазен синтез. Проследени са фазообразуването и структурните трансформации на праховете чрез рентгенофазов анализ и инфрачервена спектроскопия. Установено е, че присъствието на фазата Zn_2TiO_4 е причина за слабите фотокаталитични свойства на сместа спрямо моделното багрило Малахитово зелено.

3. Зол-гелен синтез на прахове съдържащи TeO_2 и TiO_2 в дву- и трикомпонентни системи с тяхно участие (работи 8, 10, 11, 13, 15, 16, 17, 18)

Получени са нови и оригинални данни относно процесите на гелообразуване и фазаобразуване в трикомпонентните системи ($\text{TiO}_2\text{-TeO}_2\text{-SeO}_2$, $\text{TiO}_2\text{-TeO}_2\text{-B}_2\text{O}_3$ и $\text{TiO}_2\text{-TeO}_2\text{-ZnO}$). Синтезирани са хомогенни, прозрачни и монолитни гели в широки концентрационни граници и различно съотношение на компонентите. Определени са областите на гелообразуване и в трите системи. Изследвани са фазовите промени на гелите и е установено, че аморфната органично - неорганична структура се запазва до около 300°C и причината за това е присъствието на органични и хидроксилни групи. При по-високи температури (над 300°C) и в зависимост от състава е установено едновременно присъствие на различни кристални фази - TiO_2 (анатаз), $\alpha\text{-TeO}_2$, TiTe_3O_8 , ZnTeO_3 , ZnTiO_3 и Zn_2TiO_4 . Доказано е, че присъствието на TeO_2 стимулира фазовият преход анатаз \rightarrow рутил при пониски температури. С ИЧ спектроскопия е определено, че близкият порядък на фазите над 300°C се определя основно от TiO_6 , TeO_n , SeO_3 , BO_3 , BO_4 и ZnO_6 структурни групи.

Изследвани са фотокаталитичните и антибактериални свойства на нанокomпозитни прахове съдържащи SeO_2 . Установено е, че фотокаталитичните свойства на двукомпонентни състави съдържащи SeO_2 са съпоставими с тези на чист TiO_2 при разграждане на органичното багрило Малахитово зелено, но също и по-добри от тези на трикомпонентните състави съдържащи едновременно SeO_2 , TeO_2 и TiO_2 . Изследваните нанокomпозитни прахове притежават добра антибактериална активност спрямо щама *E. coli*.

В заключение основните приноси в това направление от изследвания могат да се обобщят по следния начин:

➤ Изследвани са условията за получаване на наноразмерни дву- и трикомпонентни прахове съдържащи TiO_2 чрез няколко зол – гелни техники: хидролитичен, нехидролитичен и изгаряне в разтвор („combustion“) зол-гелен метод;

➤ Доказано е, че комбинирането на различни но съвместими мрежообразуватели в подходящи концентрации води до получаването на монолитни и прозрачни трикомпонентни гели;

➤ Експериментирани са оригинални комбинации от изходни суровини, чрез които са получени наноразмерни прахове, за които са доказани интересни фотокаталитични и антибактериални свойства.

➤ Установено е, че за получаването на наноразмерни прахове най-подходящ е „combustion“ зол-гелния метод.

➤ Аморфни хибридни TiO_2 съдържащи материали са получени в трикомпонентни системи с участието на класически (B_2O_3), междинен (ZnO) и нетрадиционни (SeO_2 , TeO_2)

мрежообразуватели. Наблюдавано е, че аморфността им се запазва до около 300°C и причината за това е присъствието на органични и хидроксилни групи;

➤ Потвърдено е, че механохимичното активиране е перспективен метод за разработване на многокомпонентни материали за фотокаталитични приложения.

Насоки за бъдещо развитие на кандидата и по - нататъшни експериментални изследвания

Добре известно е, че основните трудности при синтеза на селенитни материали са продиктувани предимно от високата склонност към сублимация на стопилките при температури над 315°C и атмосферно налягане. От друга страна, синтезът на телуритните стъкла също е съпроводен с трудности, които произтичат от разлагането на TeO_2 при температури над 1000°C, докато за TiO_2 е характерна висока температура на топене, която изисква наличието на специална апаратура за получаването на такива състави. **Всички тези причини ограничават избора на компоненти при използването на високотемпературните методи за синтез при получаването на многокомпонентни селенитни, телуритни и титанатни състави, което ограничава и получаването на нови материали с интересни свойства.** Това налага и непрекъснатото търсене на нови алтернативни и възпроизводими методи за синтез, които са приложими за получаването на подобни материали. Именно **зол-гелният метод** отговаря на посочените условия.

Имайки предвид казаното по-горе, както и основните научни направления развиващи се в лаборатория „Високотемпературни оксидни системи“, насоките за бъдещо развитие на кандидата могат да се систематизират по следния начин:

➤ Получаване на нови прозрачни и монолитни гели в неизследвани до момента трикомпонентни системи с участие на различни мрежообразуватели и прилагането на различни зол – гелни технологии;

➤ Търсене на подходящи органични и неорганични прекурсори и съотношение за тяхното комбиниране с цел получаването на нови и оригинални състави с интересни свойства; Разработване на работни термични режими за получаване на наноразмерни прахове. Изследвания за влиянието на температурата на нагряване върху фазообразуването, структурата и морфологията на получените прахове;

➤ Да се установи влиянието на различни прекурсори върху процесите на гелообразуване, фазообразуване, структурата и морфологията на частиците на получените крайни продукти;

➤ Да се установи влиянието на отделните компоненти в една система върху фазовия преход TiO_2 (анатаз) \rightarrow TiO_2 (рутил).