

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Митко Георгиев

за дисертационен труд на докторант Деляна Маринова Манасиева

на тема: *“Вибрационно поведение на матрично-изолирани тетраедрични йони и HDO молекули в неорганични соли - сулфати, селенати, хромати и формиати”*

с научни ръководители: проф. дхн Донка Стоилова и доц. д-р Митко Георгиев

Целта на научните изследвания, дискутирани в дисертационния труд, е да се проучи възможността за приложение на матричната инфрачервена спектроскопия за разработването на експресен метод за идентифициране вида на включвания в минерали (механично или чрез заместване). Обект на изследванията са минерали от вида $MeXO_4$ ($Me = Ca, Sr, Ba, Pb; X = S, Se, Cr$), съдържащи матрично-изолирани $X'O_4^{2-}$ йони ($X' = S, Se, Cr$), и двойни соли хромати с кръонкитов тип тетраедрично-октаедрични вериги $K_2Me(CrO_4)_2 \cdot 2H_2O$ ($Me = Co, Ni, Zn, Cd$), съдържащи матрично-изолирани SO_4^{2-} йони.

Чрез рентгенова дифракция са дешифрирани кристалните структури на четири двойни соли с кръонкитов тип вериги от вида $K_2Me(CrO_4)_2 \cdot 2H_2O$ ($Me = Co, Ni, Zn, Cd$). Показано е, че $K_2Zn(CrO_4)_2 \cdot 2H_2O$ е представител на нов, неописан в литературата структурен вид.

Чрез задълбочен анализ на инфрачервените спектри на матрично-изолирани тетраедрични йони в изследваните обекти е оценено влиянието на различни кристалохимични и химични фактори върху степента на енергетична деформация на изоморфно и изодиморфно включените йони. Установено е, че степента на енергетична деформация на CrO_4^{2-} в изследваните хромати, а така също и на матрично-изолираните в тях SO_4^{2-} йони, зависи съществено от здравината на връзките $Me^{2+}-OXO_3$, оценена по нейната валентност, електронната конфигурация на двувалентните метални йони, респективно енергията им на стабилизация в кристално поле (ЕСКП) и здравината на водородните връзки. Чрез метода на изотопно разреждане е установено, че здравината на водородните връзки в двойните соли с кръонкитов тип вериги корелира с техните дължини, степента на ковалентност на връзките $Me-OH_2$ и протон акцепторния капацитет на протон акцепторите.

Чрез прилагане на вариант на метода на двойно матрична инфрачервена спектроскопия е изследвано катионното разпределение в изоструктурните серии $Mg_xZn_{1-x}(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$ и $Mg_xMn_{1-x}(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$ и експерименталните резултати са потвърдени чрез рентгенова дифракция на монокристали.

Проведените изследвания еднозначно показват, че матричната инфрачервена спектроскопия може с успех да бъде приложена като метод за експресно определяне вида на включвания в минерали. Йони, включени в кристалите на солта-домакин на основата на изоморфно, респективно изодиморфно заместване, показват спектър, съществено различен от този на солта, която йонът-гост образува с катиони, еднакви с тези на солта-домакин. Едно от големите предимства на спектроскопския метод е неговата голяма чувствителност към концентрацията на включените йони.

В процеса на подготовката на дисертационния труд Деляна Манасиева усвоява различни научно-изследователски методи: кристализационни и утаечни методи за синтез на неорганични соли и смесени кристали от тях; физико-химичен анализ на водно-солеви системи; различни химични методи за анализ; рентгенова дифракция и вибрационна спектроскопия; да анализира литературни данни по проблеми и методи, пряко свързани с нейните задачи. Необходимо беше да се запознае с някои основни правила в теорията на структурната химия, вибрационната спектроскопия, теория на изоморфизма и други, които е изучавала само информативно в процеса на висшето си образование. Това наложи полагането на максимални усилия и концентрация на енергия от нейна страна в процеса на научно-изследователската й дейност. Деляна Манасиева се прояви като отговорен, енергичен и всеотдаен изследовател, изключително прецизен в експеримента химик, което й позволи да бъде съавтор на двадесет и две научни публикации, от които десет са включени в дисертационния труд. За своята научно-изследователска дейност докторантката получава наградата на БАН “Иван Евстратиев Гешов” за 2008 г. Придобитите от нея умения и знания помагат за оформянето й като добър специалист-неорганик с отлична възможност да се справи успешно и с други задачи в много по-широк спектър от научно-изследователски проблеми.

Съвместната ни работа с ас. Манасиева и представеният дисертационен материал ми дават убедеността да препоръчам на уважаемото жури да присъди на докторантката образователната и научна степен „доктор”.

София
05.10.2011 г.

Подпис:.....
/доц. д-р Митко Георгиев/