

Кратка авторска справка за оригиналните научни приноси

в трудовете за конкурса включени в група показатели „Г“.

на доц. д-р Диана Рабаджиева

представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“
по професионално направление 4.2. Химически науки (Неорганична химия)

Научни публикации, общ брой	76
В списания с импакт фактор или SJR	41
В нереферирани научни списания без импакт фактор	21
В сборници в пълен текст	10
Глава от книга	1
Издание на ИОНХ-БАН (с ISBN)	1
Научно популярни	2
Публикации включени в конкурса за заемане на академична длъжност “професор”	20
В списания с импакт фактор	17
В реферирани научни списания без импакт фактор, с SJR	3
Цитати на всички публикации	275
Цитати за участие в конкурса	190
h-index съгласно цитати на всички статии (Scopus, Web of Science, Google Scholar)	10
Участие в научни мероприятия	170
Участие в научни мероприятия след хабилиране	68
Участие в проекти, общ брой	27
Международни	5
Национални, финансирани от ФНИ или МОН	14
Финансирани от частни фирми	2
Проект към ИОНХ за развойна дейност	1
Други (в това число по ЕБР и COST лично участие)	5
Ръководство на докторанти	2*

* 1 успешно защитил докторант и 1 – трета година на самостоятелна подготовка

Научните ми постижения в трудовете, включени в показатели „Г“ са свързани с установяване на някои закономерности при изследване на връзката *синтез - състав – структура – свойство* при получаване на различни неорганични материали и на връзката *химични форми – биоусвояемост при* изследване на природни системи.

1. Връзка синтез - химичен състав - фазов състав – морфология – биосъвместимост при модифицирани калциеви фосфати

- Оптимизиран е метод за получаване на двуфазни фини калциево-фосфатни прахове. Установено е, че органичните модификатори (глицерин и хидрогели от касантан гум и гуар гум) на биомиметичната реакционна среда (симулирана тъканна течност)

влияят върху размера на частиците, но не и върху фазовия състав на калцинирани при 1000°C прахове от калциев фосфат. Във всички изследвани случаи са получени двуфазни фини прахове от калциев фосфат с добре оформен сферични зърна, състоящи се от β -трикалциев фосфат (β -TCP) и хидроксиапатит (HA). Модификаторите на SBF намаляват размера на частиците на получените прахове в последователността гуар гум \approx ксантан гум < глицерин < SBF (труд 33).

- Разработен е метод за получаване на йонно-модифицирани калциеви фосфати. (труд 34, 37). Доказано е, че йонно модифицираният аморфен прекурсор се трансформира в (Mg, Zn) β -TCP след калциниране при 1000°C като променя структурните характеристики на β -TCP. Изменението в параметрите на елементарната клетка е по-ясно изразено при Zn-модифицираните образци, поради разликите в предпочитаните от Zn и Mg полиедрични обкръжения (труд 34, 37). Чрез *in vitro* изследвания, съвместно с колеги от ИЕМПАМ-БАН, е доказана добрата цитосъвместимост на получените от нас прахове от (Mg, Zn) β -TCP. Изследванията показват, че Zn- β -TCP намалява, а Mg- β -TCP увеличава преживяемостта и пролиферативна активност на клетките, но разликите са незначителни (труд 34).
- Разработен е метод за получаване на композитни материали на основата на прахове от (Mg, Zn) β -TCP и биоразградими полимерни матрици (ксантан гум, желатин и карагенан). Биосъвместимостта на композитите е доказана с *in vivo* изследвания върху плъхове, съвместно с колеги от ИЕМПАМ-БАН (труд 32).
- Обобщени са методите за изследване на антимикробни свойства на калциево-фосфатни материали с приложение в денталната медицина (труд 50). (Публикацията е резултат от участието ми в проект COST TD1305 iPROMEDI, Improved Protection of Medical Devices Against Infection. Моят принос е свързан със калциево-фосфатните материали).

2. Връзка синтез – състав – структура при двойни соли от типа $x\text{Gly}_y\text{ZnX}_z \cdot z\text{H}_2\text{O}$ (X = Br⁻, I⁻, x = 1, 2, 3; y = 1, 3; z = 0 2,4)

- Получени са по две равновесни безводни двойни соли и по една метастабилна двойна сол кристалохидрат в системите Gly - ZnI₂ - H₂O и Gly - ZnBr₂ - H₂O при 25°C, а именно Gly.ZnI₂, 2Gly.ZnI₂, 2Gly.3ZnI₂.4H₂O, Gly.ZnBr₂, 3Gly.ZnBr₂ и 2Gly.ZnBr₂.2H₂O (труд 39,42) .
- Разшифровани са кристалните структури на 2Gly.ZnI₂ (моноклинна кристална система, пространствена група C2/c) и 2Gly.3ZnI₂.4H₂O (триклинна кристална система, пространствена група P-1), Gly.ZnBr₂ (моноклинна кристална система, пространствена група P2₁), 3Gly.ZnBr₂ (орторомбична кристална система, пространствена група Pna2₁), 2Gly.ZnBr₂.2H₂O (моноклинна кристална система, пространствена група C2/c) (труд 39,42). Установено е, че основните структурни единици на кристалните структури са смесени електронеутрални тетраедри, изолирани в случай на $x\text{Gly ZnX}_2 y\text{H}_2\text{O}$ (x = 1, 2, 3; y = 0, 1, 2) или свързани в по-сложни полимерни вериги в случаите на Gly ZnX₂ и 2Gly 3ZnI₂ 4H₂O.
- Изучени са термичните свойства и е предложен механизъм на термично разлагане (труд 39,42).

3. Връзка структура на разтвора – кинетика на кристализация на многоразтворими соли

- На базата на теорията на Пирсон за „твърди и меки“ Люисови киселини и основи и скалата на Клопман за „твърдост и мекост“, Раман спектроскопски анализи на взаимодействията в наситените разтвори на четирикомпонентната взаимна система Na^+ , $\text{Mg}^{2+}/\text{SO}_4^{2-}$, $\text{Cl}^-/\text{H}_2\text{O}$ и термодинамично моделиране активността на водата в системата е доказано, че с намаляване активността на водата се стимулира процеса на дехидратация на магнезиевите хексаакваоктаедрични комплекси и образуването на по-сложни смесени аква-сулфатни комплекси (труд 38).
- Установена е пряка връзка между наличието на различни магнезиево – сулфатни асоциати в наситените разтвори на системите $\text{MgCl}_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ и $\text{NaCl - MgSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ и скоростта на кристализация на съответните соли в тези системи (труд 38).

4. Връзка състав – термични свойства

Публикации 35, 41 и 44 (т.5 връзка състав – гелообразуване) са резултат от изпълнение работната програма на договор Е 02-1/12.12.2014 „Изследване на взаимодействието на сложно-съставни силикати от металургичната шлака с алкални разтвори“, ръководител доц. д-р Иван Генчев Пенков и базова организация Институт по металознание, съоръжения и технологии „Акад. Ангел Балевски“ с Център по хидро- и аеродинамика

Посочените приноси отразяват личното ми участие и ангажираност.

- Оптимизиран е процесът на окисление на медна пирометалургична шлака, като първи етап в технология за нейното оползотворяване. Получени са термични и термогравиметрични данни за окисление в газова среда с различни парциални налягания на кислород и различен дебит на окисляващия газ.
- Получени са оригинални данни за активизираща енергия и предекспоненциален фактор и механизма на процеса на окисляване на медна пирометалургична шлака в газова среда с различни парциални налягания на кислород и различен дебит на окисляващия газ. Установено е, че окислението се съпровожда със структурна трансформация на шлаката (труд 35, 41).
- Построена е диаграма *Относителна влажност – Температура* за системата $\text{Na}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ в температурния интервал 0 - -100°C и на нейна база е предложен механизъм на разлагане на $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ при охлаждане с решаващата роля на присъствието на влага. Сходството в кристалните структури на $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_2\text{SeO}_4 \cdot 7.5\text{H}_2\text{O}$ и в диаграмите на разтворимост на двуконпонентните системи $\text{Na}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_2\text{SeO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ е основа за допускане на протичане на един и същи механизъм на разлагане при охлаждане на $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_2\text{SeO}_4 \cdot 7.5\text{H}_2\text{O}$ (труд 46).

5. Връзка състав – гелообразуване

- Установено е, че понижаването на концентрацията на Si в алкалния силикатен разтвор, получен след автоклавно третиране на окислена пирометалургична шлака с разтвор на NaOH, води до понижаване на началното pH на гелообразуване.

Установено е, че видът и концентрацията на киселините, с които се осъществява процесът на гелообразуване, не оказва съществено влияние върху началното рН на гелообразуване (труд 44).

6. Връзка състав – химична форма – фитоаккумуляция

- Получени са нови аналитични данни за динамиката на преходни метали (Al, Fe, Mn, Ni, Cu, Zn и Pb) във води, почви и растителност в две агро-индустриални зони на район Мъглиж. Редът на изменение концентрацията на металите във води е Ni>Al>Pb>Zn>Mn>Cu>Fe, в почви – (Al, Fe)>>Mn>Zn>Ni>Pb>Cu и в некултивирана растителност – Fe>Zn>Al>Mn>Cu>>Ni,Pb (труд 47).
- Доказана е по-висока обменна мобилност на йоните на изследваните преходни метали от почвите в сравнение с водоразтворимата мобилност, като при Zn и Mn, които показват най-висока обменна мобилност, разликата е с повече от един порядък (труд 47).
- Изчислени са формите на разпределение на преходните метали във водно-почвените разтвори и е установено, че при Cu и Zn, които се акумулират в най-голяма степен в изследваната растителност, доминиращи са метал-органични комплекси, а при Mn, който практически не се акумулира в растителността, доминиращи са свободни йони или неорганични комплекси (труд 47).
- Редът от комплексни форми, които преференциално се акумулират в растенията е OrgMe (бидентатни комплекси) > OrgMeOH(бидентатни комплекси) > Me²⁺> OrgMe+(монодентатни комплекси) > неорганични комплекси.
- Оценен е потенциалния екологичен риск на повърхностни сладки води чрез прогнозиране химичните форми на съществуване на Al, Mn, Zn и Pb при протичане на спонтанни утайтелни реакции, както и при вариране на основните фактори - рН, концентрации на изследваните елементи, на SO₄²⁻ йони и на разтворен органичен въглерод (DOC). Установено е, че върху образуването на комплекси в повърхностни води най-силно влияе рН на средата, последвано от концентрациите на DOC и на микроелементите. Направените прогнози са потвърдени чрез прилагане на теорията на Пирсон за „твърди и меки“ Люисови киселини и основи и оценка екологичното състояние на води от райони в Западни Родопи, характеризиращи се с различен тип замърсяване (труд 51).