

СТАНОВИЩЕ

на доц. д-р Екатерина Жечева

относно дисертационния труд на ас. Деляна Маринова Манасиева, докторант на самостоятелна подготовка в ИОНХ-БАН, представен за придобиване на образователната и научна степен „Доктор” по *професионално направление 4.2 “Химически науки”* (неорганична химия) на тема ”Вибрационно поведение на матрично-изолирани тетраедрични йони и HDO молекули в неорганични соли – сульфати, селенати, хромати и формиати” с научни ръководители проф. дхн Донка Стоилова и доц. д-р Митко Георгиев

Дисертацията на Деляна Манасиева е посветена на една сравнително нова насока във вибрационната спектроскопия, а именно приложението на матричната вибрационна спектроскопия при някои соли сульфати, селенати, хромати и формиати с оглед получаването на информация за локалната им структура. Целта на дисертацията е формулирана точно и ясно.

Литературният обзор е посветен на матричната инфрачервена спектроскопия на тетраедрични аниони XO_4^{n-} и HDO молекули и е направен анализ на здравината на водородните връзки в соли кристалохидрати. От него проличава, че дисертантката е наясно с проблема и е запозната с най-новите литературни източници. Експерименталният материал, съдържащ се в дисертацията, е впечатляващ по отношение на обема си. Изследвани са три типа соли: (i) соли от типа MeXO_4 ($\text{M}=\text{S}, \text{Se}, \text{Cr}$; $\text{Me}=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}, \text{Pb}$), където са получени данни за вибрационните свойства на изолирани сулфатни, селенатни и хроматни йони; (ii) двойни соли от вида $\text{K}_2\text{Me}(\text{CrO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Me}=\text{Mg}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}, \text{Cd}$) с кръонкитов тип структура, където са изследвани вибрационното поведение на хроматните йони на матрицата, здравината на водородните връзки, както и вибрационното поведение на включени изолирани сулфатни йони в хроматните матрици; (iii) твърди разтвори формиати от вида $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Mg}_x\text{Mn}_{1-x}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, където е определено разпределението на катионите по кристалографски позиции. Обединяващият елемент на тези три класа съединения е общият методичен подход. За последните две системи е потърсено потвърждение на резултатите от спектроскопските изследвания и чрез независим метод, а именно монокристална рентгенова дифракция. Впечатлението е, че изследванията са проведени много прецизно и получените резултати са задълбочено анализирани.

Основен принос на дисертационния труд е оценката на влиянието на кристалохимичните и химичните фактори върху степента на енергетична деформация на матрично-изолираните йони. От методична гледна точка тези резултати обогатяват информацията относно възможностите на матричната и двойно-матричната инфрачервена спектроскопия за анализ на локалната структура на кристални соли. Едновременно с това в дисертацията са получени и други нови данни, например установяването на нов структурен тип при двойните хромати.

Дисертацията съдържа резултати от 10 научни публикации, 8 от които са в реномирани специализирани международни списания (*Vibrational Spectroscopy* – 3, *Journal of Molecular Structure* – 5) и са докладвани на 12 научни форума. Върху публикациите са забелязани 30 цитата. Тези наукометрични показатели многократно надхвърлят изискванията, необходими за придобиване на научната степен „доктор”. Личните ми впечатления от работата на дисертантката са, че тя е компетентен млад учен в областта на инфрачервената спектроскопия.

В заключение, дисертационният труд на Деляна Манасиева по актуалност, обем и качество изпълнява изискванията на Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в ИОНХ-БАН. Подкрепям искането на Деляна Манасиева да ѝ бъде присъдена образователната и научна степен „доктор”.

15.09.2011

Е. Жечева