

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

(Справката касае **само** включените за участие в конкурса публикации след придобиване на званието (длъжността) ст. н. с. II ст. (26. 11. 1986 г.) и **техните** цитирания (без явни и скрити авто-цитати), номерирани съгласно приложения към документите списък.)

Публикациите най-общо са свързани с изследване структурата и някои физични свойства и взаимодействия в най-разнообразни природни и синтетични твърди среди (кристали, неподредени и дефектни материали, стъкла, микро-порести материали, нано-размерни структури и т.н.), както и развитието и разработката на специфични структурни, оптични, спектроскопични, математични и програмистки подходи и теоретични методи, приложими за тези цели. Поради това считам, че **всички** предложени за рецензиране по конкурса трудове и други материали са пряко свързани с или имат непосредствено отношение към неговата тема „Структура, механични и термични свойства на кондензираната материя” (шифър 01.03.25). Част от тях са резултат от изследванията ми, проведени във Физико-химическия институт на Университета в Хайделберг, Германия, финансирани от фондацията Александър фон Хумболдт, а останалите са извършени в ИМК (ИПМ, ЦІМК) – БАН, били са финансирани в рамките на множество научно-изследователски проекти, в основата са на пет успешно защитени дисертации и **по същество** са базата на интердисциплинарната тематика на ИМК през последните 20 години. Поради твърде разностранния и многообразен характер на трудовете, по-долу ще ползвам за авторската справка частично хронологичен подход, както и групиране на работите по метод на изследване, тип изследвани материали и обща цел и идея на изследването.

1. Разработена е **нова оригинална LICVD технология** за нанасяне на тънки слоеве от Cr(C,O) от Cr(CO)₆ с ексимерен импулсен лазер (248 nm), пълно изследвани са **механизмите** на израстване на слоевете и **кинетиката** на действащите процеси, както и са **моделирани** свойствата на получаваните слоеве чрез контролиране на режима и на технологичните параметри (1–3,5,9). Предложен **принципно нов метод** за *in-situ* наблюдаване и контролиране процеса на израстване на тънки слоеве чрез следене на изменението в лазерното пропускане на слоя (9).
2. Създаден е **оригинален метод** за изследване морфологията на тънки аморфни слоеве чрез оптически възбудени импулси на повърхнинни акустични вълни (6, 76), при който се регистрират едновременно измененията, възникващи в дисперсията и в затихването на импулсите вследствие дефекти и нехомогенности в плътността и в еластичните свойства на материала на аморфния слой. Методът е успешно приложен за определяне морфологията на тънки слоеве от *a*-Si:H, нанесени върху подложки от *c*-Si чрез лазерно-индуцирано отлагане от газова фаза (LICVD).

3. Създадена е оригинална компютърна програма за пресмятане на поляризиранни вибрационни спектри (раманови и инфрачервени) на неподредени системи (11), която е приспособена и приложена за изследване на някои общи теоретични проблеми и на **голям брой** конкретни материали с научна, практическа и технологична важност, а именно:

- *силикатни стъкла*, съставени от изолирани структурни единици (различен тип пръстени) с:
 - топологичен безпорядък (12, 13);
 - с наложени гранични условия (14);
 - влияние на различните типове безпорядък и деформации на пръстените (17–20);
 - структурни параметри на пръстени от SiO_4 -тетраедри (38);
 - пръстени в непрекъснати Si-O мрежи (43);
 - влияние на безпорядъка върху термодинамичните параметри (26);
- влияние на не-тетраедралните катиони върху Si-O трептенията в *сложни силикати* (36);
- модел на раманови спектри, пресметнат от степента на структурен безпорядък в *натриево метасиликатно стъкло* (30);
- влияние на индуцираното от структурен безпорядък междумодово свързване върху вибрационните спектри на *стъкла* (31);
- кластерна апроксимация при моделиране вибрационните спектри на *кристален и стъклообразен CaSiO_3* (21, 25);
- фактори, определящи степента на кристалност на смеси от *кристално-аморфни SiO_2 -фази* при измерване чрез рентгенова дифракция и инфрачервено поглъщане (17).

4. Получаване чрез вибрационна спектроскопия и структурен анализ **на нови факти и данни за:**

- структурно-формиращата роля и влиянието на водата в риолитни стъкла (8);
- желязо-съдържащи хидро-волфраматни (7, 10);
 - $\text{WO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (22, 23);
 - турмалини (39);
 - пироклорни кристали (44);
 - Pb_5MoO_8 (46);
 - $\text{Bi}_2(\text{MoO}_4)_3$ (48);
 - $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}:\text{Mn}$ (48);
 - силенити $\text{Bi}_{12}(\text{Si},\text{Mn})\text{O}_{20}$ (50);
- влияние на легирането върху структурата на $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (51);
- моделиране в просто кластерно приближение на протонно-обменен $\text{H}:\text{LiNbO}_3$ (60);
- хидролизирани прекурсори за калциево-фосфатни био-керамики (61);
- метало-съдържащи борно-карбидни керамики (65);
- волфрам-съдържащи гьотит и хематит (66);
- нано-размерни фази, образувани при волфрам-полианион-активирани зол-гел процеси (68-70);

- високо-температурно синтезиран нано-размерно-структуриран MgB_2 (71), метамиктен циркон с различна степен на аморфизация (72);
- влияние на добавки от цирконий върху структурата и фазовия състав на хидроксиапатит-базирани нано-композити (74);
- синтез и характеризирание на Zn -съдържащи калциево-фосфатни биокерамики (77);
- локална структура и динамични ефекти в релаксор-фероелектрични моно-кристали от $\text{PbSc}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ и $\text{PbSc}_{1/2}\text{Ta}_{1/2}\text{O}_3$ (64).

5. Детайлно за **първи път** са изследвани **оптичните параметри и структурата** на широк клас оптични кристали, определящите ги фактори, влиянието на легиране с различни елементи, фазо-образуването, моделите на атомно преподреждане и локалната структура на:

- $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{F}_2$ ($0 \leq x \leq 1$) (73, 75, 78, 85);
- $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}:\text{M}$ ($\text{M}=\text{Cr}, \text{P}, \text{Cr}+\text{P}$) (79, 83, 84);
- $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ($\text{Mn}, \text{V}, \text{Co}, \text{V}+\text{Co}$) (80).

Въз основа на наблюдаваните зависимости са предложени реалистични **модели** за обяснение на структурните фактори, въздействащи оптичните параметри на такива кристали и са посочени начини за **модифицирането им** чрез контролирано легиране.

6. За **първи път** е **наблюдавано експериментално** значително нарастване на интензитета на раманово разсейване от LO фонони с определена симетрия в слабо легирани полупроводници и **са оценени теоретично** възможните механизми за възникване на този ефект (81).

7. За **първи път** е **предложена и реализирана** инфрачервена микро-спектроскопия, основана на нарушено пълно вътрешно отражение (ATR-IR) на поляризирано синхотронно лъчение, демонстрирани са потенциалните възможности на този нов метод за безразрушителен структурен анализ и той е приложен за изследване на свързаните със структурния безпорядък изменения в частично-неподреден (метамиктен) циркон (82).

8. **Конструиран и физически реализиран** е неколинеарен акусто-оптичен настройващ се филтър на базата на кристал от TeO_2 , като детайлно са пресметнати, моделирани и **изследвани експериментално** неговите **функционални параметри** (ивица на пропускане, спектрална разделителна способност и дифракционна ефективност) като **функции на операционните му параметри** и режима на работа (посока на разпространение на оптичните и акустичните вълни, дължина на акусто-оптичното взаимодействие и плътност на мощността на управляващия радио-честотен сигнал). (24, 32, 42, 51, 52)

9. Получени са **основополагащи** резултати по **синтезиране, модифициране, експериментално определяне и теоретично моделиране** на параметрите на разнообразни **нови** микро-порести (зеолито-подобни) материали и тънки слоеве от тях върху различни подложки, намиращи широко приложение като

катализатори, сорбенти, молекулни сита и др., а именно определени и изследвани са:

- степента на кристалност на ZSM-5 (15);
- физико-химичните свойства на ETS-4, ETS-10, zorite (33, 34);
- определяне влиянието на свойствата на металната подложка върху кинетиката на образуване на тънки зеолитни слоеве (27, 29);
- In-situ кристализация на зеолит А, Y и silicalite-1 върху кристални и аморфни мулитови влакна (28);
- адхезивност, термична стабилност и морфология на тънки слоеве от молекулни сита върху метални подложки (Y, silicalite-1, SAPO-5) (37);
- кинетични изследвания на влиянието на различни йони върху кристализацията на ETS-4 (41);
- характеризиране на водата в микро-порести титаниеви силикати (45).

10. В работи (54-59) е **създаден, развит и анализиран** приближен пространствен математически модел на различните разновидности атоми и на периодичния закон на Менделеев. В него са дефинирани три- и две-мерните математически изображения на основни химически понятия, като химичен елемент, група и период в Периодичната Система, и е аксиоматизирана статиката им чрез формулиране на множество от дефиниции, аксиоми, теореми, лемми, съждения и свойства. **Разработен** е математически формализъм за геометризиране на статиката и динамиката на простите и сложните химически обекти и на метод за конструиране на пространствени математически модели на някои основни химични понятия и съотношения. По такъв начин е направен „пълнен“ логически превод на химията на езика на геометрията, която е в по-напреднал стадий на развитие и може да се използва за разширяване и прецизиране на представянето на химически понятия и закономерности.

11. Предложен е **оригинален метод** за определяне на *цепителността* на флуоритови кристали (62).

12. Изследвана е температурната зависимост на повърхнинния фото-индуцирания зарядов ефект в CdS (53), както и възможността за използване на този ефект на интерфейса течност/твърдо тяло за изследване на течности (67).

Предложение за жури по конкурса:

Професори

Марин Господинов – ИФТТ-БАН

Веселин Страшилов – Софийски университет, Физически факултет

Минко Петров – ИФТТ-БАН

Савчо Тинчев – Институт по електроника – БАН

Иван Лалов (пенсионер, СУ) - резерва

Доценти

Красимир Стойчев – Пловдивски университет, Физически факултет

Мирослав Абрашев - Софийски университет, Физически факултет

Атанаска Андреева - Софийски университет, Физически факултет

Борис Шивачев – ИМК-БАН