

Доц. д-р Огнян Е. Петров

**Авторска справка  
за научната и публикационна продукция**

**Научна номенклатура – Минералогия и Кристалография**

**Общ брой публикации – 63 след 1993 г. (година на хабилитация за „доцент”)**

**Общ брой цитати – 177, от които 154 след 1993 г.**

**Основни научни тези:**

**Моделиране и модифициране на минерални системи**

Интензивното изучаване на минерали, минерални суровини и нови материали, притежаващи ценни свойства, е приоритетна задача. Синтезът на кристални вещества с предварително прогнозирана структура е от особен интерес. В този смисъл *моделирането и модифицирането на минерални системи* е необходима основа при изучаването на перспективни материали.

В понятието *моделиране* включваме разбирането, че всички процеси, свързани със синтез, кристализационни схеми, израстване на кристали и формиране на кристални фази са всъщност моделиране на определена кристализационна среда. От друга страна то се извършва и с множество съвременни софтуерни програми за обработка на цифрови експериментални данни. При тях се прилагат моделни спектри, профилен анализ на пикове, моделиране на структури и т.н. Оптималната комбинация от двата типа *моделиране* води до успешно решаване на поставените задачи.

В понятието *модифициране* на минерални системи се влага смисълът, че важни минерални суровини (бентонити, природни зеолити, вермикулит, каолинит) след определено третиране (химично, трибохимично, термично, йонен обмен) добиват нови и полезни за практиката свойства. Същото се отнася и за синтетични продукти, получени в лабораторни условия (синтетични зеолити, микропорести титано- и цирконосиликати, хидроталкити, биоматериали и т.н.).

**Минералите – структурно-кристалохимична база за дизайн на нови материали.**

Опитът показва, че определени минерални структурни конфигурации лежат в основата на материали с ценни свойства. Например релациите: **природни зеолити** – микро- и мезопорести материали; **титано- и цирконосиликатни минерали** - микропорести и слоисти продукти; **минерали с апатитова структура** – биокерамични материали; **слоисти минерали** – хидроталкитови състави; **перовситов тип структура** – свръхпроводници, релаксори, фероелектрици; и т.н.

**Области на изследвания:**

**1. Минералогия**

**Публикувани са резултати от минераложки изследвания в 12 статии, засягащи:**

- Химичен състав и строеж на домените в волфрам-съдържащи гьотити от находище Грънчарица [1 от списъка с публикации]; описание на кристали на самородна платина в Еоценски наслаги от Новоселци, Бургаско [2]; изследвана е минералогията, геохимията и съдържанието на пирит в суб-битуминозни въглища от Пернишкия басейн [5]; структурата и валентното състояние на желязото в кристални и аморфни железни оксиди [21]; получени са нови данни за гранатови минерали от Сакар, ЮИ

България [29, 30]; характеристика на олигоценски фосфорити и флуорапатит от български находища [34, 35]; изследвано е структурното състояние на български опали и е доказано съществуването на опал-тридимит [37]; доказана е модификацията Mn-норсетит – първа находка в България [42, 52]; описани са два нови минерала за България – boyleite и zincian rozenite [56].

## 2. Приложна минералогия

### Резултатите са отразени в 7 статии

Изследвани са възможностите за използване на природни и модифицирани зеолити като добавка в почви за подобряване на хумусните свойства – особено важно за слаби, замърсени с тежки метали или ерозирани почви [18, 19, 20]. Анализирани са възможностите на моделирането и модифицирането на минерални ситеми като основа за създаване на нови материали [23]. Приносът ми е към характеризирането на моделните почвени композити но не и към конкретните агро-технически подготовки регламентирани от К. Чакалов и колеги.

Чрез комплекс от методи са изследвани фазовите и структурните промени след трибохимична активация на апатити (на примера на сирийски фосфорит) и влиянието на наноразмерността върху свойствата на апатитовата суровина [39, 40, 53].

## 3. Природни зеолити

Разработен е кристалохимичен подход за директна оценка на степента на йонен обмен (на  $Ba^{2+}$ ,  $Sr^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$ ,  $Cs^+$ ,  $Tl^+$ ,  $K^+$ ) на клиноптилолит, чрез детайлен анализ на поведението на структурния фактор, F, на рефлексите 020 и 040 и респективно използване на интензитетите им, I, за химическа оценка на степента на обмен [9]. За първи път е доказан в България Sr-съдържащ хабазит (кариера Кайряка, Бургаско) [10] и е уточнена неговата структура, както и на допълнително обменента на Sr негова форма [28].

Получена и характеризирана е Zn-обменена форма на клиноптилолит [41] и е уточнена структурата на тази модификация по метода на Рирвелд [47]. Получена и характеризирана е модификация на клиноптилолит, чрез оклюзия на  $ZnCl_2$  [48]. Получена е обменена на Ag форма на клиноптилолит и е уточнено разпределението на сребърните йони в порестата структура на този зеолит, чрез използване на прахови рентгенодифракционни данни и метода на Ритвелд [59].

Интересът към тези обменни форми е предизвикан от потенциалното им приложение в медицината и фармацията заради антимикробните им свойства.

## 4. Минерали в екологията

За нуждите на екологията са разработени и изследвани природни сорбенти на базата на български зеолит (клиноптилолит) и египетски бентонит и е изследван сорбционния им ефект при пречистване на моделни замърсени води [13]. Изследвани са формите на съдържание на Cd, Cr и Ni в утайки от пречиствателни станции и седименти [24, 32]

Изследвана е способността на български зеолити клиноптилолит и морденит да сорбират сребро и цинк. Това е важно за привнасяне на микроелементи в земеделието, за медицински цели и използването на природни зеолити като сорбенти за различни цели в екологията, промишлеността и селското стопанство.

Определени са теоретичният и експерименталният йонообменен капацитет за двата сорбента и механизмът на заместване. С оглед на използването на тези зеолити като бактерициди, е изучена десорбцията на сребро във вода, а с оглед на използването им за отстраняване на токсичния елемент сребро от индустриални отпадни води е изучен цикъла

на сорбция-десорбция в кисела среда. Данните за сорбционните характеристики на зеолитите дават възможност за създаване на ефективни технологии за тяхното приложение [49, 50, 55]

## **5. Минерали в строителството**

Важен аспект при строителните материали е изследване на цименти с различни минерални добавки и изследване на хидратационните процеси и физико-механичните показатели на получените тела. Изучена е хидратацията на цимент с добавка на силициев прах и пепел от изгаряне на въглища, като за първи път това се прави за периода от първите 24 часа на хидратация [8]. Изследвани са свойствата на олекотени и експандирани цименти [11].

За първи път в България са изследвани в детайли цименти с добавка на природни зеолити (клинотилолит, мпрденит и хабазит) и са установени техните физико-механични, реоложки, порозометрични и други характеристики на цимент-зеолитните композити [60, 61, 62]. Дизайнът на експериментите е приоритет на доц. д-р В. Лилков.

## **6. Методи в праховата рентгенография**

Важни резултати са получени от методично естество като са характеризирани нови кристални вещества с комплекс от праховорентгенографски подходи за получаване на еталонни данни с високо качество, отговарящи на изискванията на Международния център за дифракционни данни (ICDD- International Union of Crystallography) за включване в международната еталонна картотека PDF.

Публикувани са еталонни данни за новата фаза  $\text{Ba}_3\text{MnSi}_2\text{O}_8$  [4], за слоистия титаносиликат JDF-L1 [15, 22], за Na-аналог на микропорестата фаза GTS-1 [17, 27], за синтетичните титаносиликати паранатисит и натисит имащи плътни структури [16].

На основат на метода на Ритвелд е разработен и приложен количествен подход за изследване на геоложки проби от различни находища [38].

## **7. Биоматериали**

Синтетичните калциево-фосфатни фази на базата на апатитната структура (минералите хидроксилапатит и витлокит) и съответните биокерамики са от особено значение за нуждите на медицината с използването им като костни заместители.

Получихме резултати, свързани с установяване за първи път на антимикробен ефект на синтезираните бифазни калциево-фосфатни керамики по отношение на бактериални щамове [6, 7]. Разработена е методология за контролирано получаване и характеристика на синтеровани Ca-P керамики [12]. Изследвано е и влиянието на добавки от цирконий и цинк върху микроструктурата на хидроксилапатитови нанокмозити [46, 51].

Проследен е процесът на самоорганизация на костно-подобен апатит, чрез постепенен преход от аморфно състояние към наноразмерни кристали [36]. Приложен е биомеиметичен подход за получаване и характеристика на модифицирани калциеви фосфати от аморфни прекурсори [57, 58, 63].

Синтезните процедури са приоритет на Р. Илиева, проф. Е.Дюлгерова, д-р д. Рабаджиева

## **8. Нови материали**

### **а) високотехнологични материали**

Обособен раздел от научните ми изследвания са свързани с прилагане на подходи за характеристика на високотехнологични материали и кристали.

Базирайки се на флуоритовата структура са изследвани технологични монокристали от  $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{F}_2$  с набор от физични и химични методи [43, 44, 54]. Подобни материали са с потенциал в оптоелектрониката и акустооптиката. Израстването на тези обекти е приоритет на д-р Й. Муховски.

Аналогично са изследвани монокристали от  $\text{Pb}_2\text{ScNbO}_6$  и  $\text{Pb}_2\text{ScTaO}_6$  [45] синтезирани в лабораторията на проф. М. Господинов.

## **б) микропорсти материали**

В последните години активно се работи по едно ново направление в сферата на микропорестите материали – титаносиликатите и цирконосилкатите. По същество това са аналози на минерали, които са редки находки в природата, но тяхната кристалохимия е водеща и микропорестите им структури са спотенциал за приложение в практиката като йонообменници, сорбенти, катализаторни системи и т.н.

Получени са серия от резултати по хидротермалния синтез и детайлното характеризирание на такива фази с микропорести, слоисти и плътни структури.

Резултатите са обобщени в две работи [25, 33], а отделно са публикувани данни за синтеза и трансформацията на паранатисит в натисит [14, 16], за експресен метод за синтез и характеристика на слоистия титаносиликат JDF-L1 [15] и на неговите фазови трансформации с температурата [22], за нискотемпературен синтез на Na-аналог на микропорестия титаносиликат GTS-1 [17, 27].

За първи път е синтезиран микропорестия цирконосилкат MCV-2 и неговата структура е решена с монокристален рентгеноструктурен анализ [26].

Дизайнът на синтезите е приоритет на доц. д-р В. Костов-Китин и докторанта Станислав Фердов.

Обособена част от резултатите ми са свързани с успешното представяне на моите докторанти, на които искрено благодаря за тяхната последователност и упоритост във финализиране на поставените научни задачи, което е пряко свързано с техните лични качества:

1. докторант **Станислав Фердов**, теза: „Синтез и кристалохимична характеристика на микропорести титаносиликати, ЦЛМК, БАН. (защитена през 2004 г.). **Носител на наградата „Марин Дринов” на БАН за млад учен през 2005 г.**

2. докторант **Милен Кадийски**, теза, Dehydration Behaviour of Ion-Exchanged and Natural Heulandite: an X-Ray Single Crystal Study. (ръководство съвместно с Проф. Т. Армбрустер, защитена в Университета в Берн през 2009 г). **Носител на наградата „Марин Дринов” на БАН за млад учен през 2011 г.**

3. докторант **Луиза Димова**, теза: Прахово рентгеноструктурно изследване на клиноптилолит, модифициран чрез йонен обмен и оклюзия на соли. (предзащита декември, 2010),