

Информация за изпълнение на етап ... на проект

Наименование на конкурса:
Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2022 г.
Основна научна област:
Науки за земята
№ на договор:
КП-06-Н64/4 от 15.12.2022
Начална и крайна дата за етапа според договора:
15.12.2022 – 15.06.2024
Брой месеци, с които е удължен етапа, и крайна дата след удължаването:
Заглавие на проекта:
Хидрати и комплекси на магнезиеви сулфати, хлориди, хлорати - синтез, структура, свойства. Поведение в симулирана среда и връзка с екологията
Базова организация:
Институт по минералогия и кристалография „Акад. Иван Костов“
Партньорски организации:
Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):
Проф. д-р Росица Николова
Общ размер на отпуснатото финансиране за отчитания етап:
125000 лв.
Интернет страница на проекта (ако има такава):
https://imc.bas.bg/projects/
Научни публикации по проекта:
Nikolova, R., Kostov-Kytin, V., Petrova, N., Kossev, K., Titorenkova, R., & Velyanova, G. (2024). New Data on Crystal Phases in the System MgSO ₄ –OC (NH ₂) 2–H ₂ O. <i>Crystals</i> , 14(3), 227. IF: 2.670; кватил: Q2 Линк: https://doi.org/10.3390/cryst14030227
Nikolova, R., Kostov-Kytin, V., Petrov, P., Tsvetanova, L., Gospodinov, N., & Metodieva, K. (2023). Sulphate mineralization from one locality in Lozen ore field, Eastern Rhodopes. Review of the Bulgarian Geological Society, 84(3). IF: 0.2; кватил: Q4 by citation indicator Линк: https://bgd.bg/review-bgs/година-84-2023-книга-3/
Velyanova, G. G., & Kossev, K. S. (2023) Environmentally acceptable synthesis of magnesium bearing fertilizers. 2. Mechanochemical preparation. <i>Bul. Chem. Comm.</i> , Volume 55, Special Issue C (pp. 33–36). IF: 0.349; кватил: Q4 Линк: https://doi.org/10.34049/bcc.55.C.0003
Kossev, K., Velyanova, G., & Nikolova, R. „Environmentally acceptable synthesis of magnesium bearing fertilizers“. <i>Proceedings of University of Ruse - 2023</i> , vol. 62, book 10.1. Линк: https://conf.uni-ruse.bg/bg/?cmd=dPage&pid=sns-proc23

Очаквани резултати според проектното предложение (до 1 стр. в рамките на полето по-долу):

През първите дванадесет месеца от проекта да бъдат закупени лабораторните консумативи и дооборудван прахов дифрактометър EMPYREAN с приставка, позволяваща измервания при ниски температури. Да се проведат синтези на комплекси на магнезиеви соли чрез трибохимичен метод.

От началото на третия месец да стартира и изпълнението на дейностите, свързани с физико-химичната характеристика на синтезираните чрез трибохимичен метод материали. Изследванията да са основа за преформулиране на методиката. За завършена се счита методиката, при която може да се получи чист продукт при оптимални условия (време на стриване, обороти и т.н.).

От началото на седмия месец да стартира работата по синтез на карбамидните и amidни комплекс на изследваните хидрати чрез изпарение от разтвор и израстване на монокристали.

В периода от седмия до тридесетия месец успоредно да се изпълняват дейностите по синтез, аналитична характеристика, физико-химична характеристика на чистите фази (чистота, степен на кристалност, кристална структура, температурна стабилност, фазови превръщания в среда на CO₂, температури, различни от стайна и налягания различни от атмосферното). Да се организират срещи за обсъждане на резултатите и последващите действия, както и промени в графиците на работа при нужда. Да се проведат обучителни семинари за представяне на теоретичните основи на използваните аналитични методи – рентгеново дифракционен, термичен и инфрачервена спектроскопия.

След седмия месец стартира и работата по подготовка на резултатите за публикуване и представяне на научни и научно-популярни форуми.

Младите специалисти, членове на екипа да бъдат включени във всички етапи по изпълнение на проекта, включително в подготовката на свои постерни представяния и процеса на публикуване на резултатите.

С изпълнението на работната програма се очаква да бъдат постигнати основните цели на проекта, а именно разширяване на познанието за кристалохидратите и комплексите на най-често срещаните в природата магнезиеви соли с данни за поведението на тези съединения в условия различни от тези на Земята повърхност. В допълнение ще бъде създаван екип от млади учени, които да продължат една от традиционните за ИМК тематик. Очакваните резултати могат да се разпределят в две групи, като резултатите от двете групи са взаимно свързани и допълващи се. Първата група обединява научните резултати със значение за научната общност, работеща в областта на геохимията и агрохимията. Втората група резултати е свързана с поддържане на високо ниво на научния екип и на аналитичния комплекс в ИМК-БАН.

Членове на научния колектив

<i>Организации/участници¹</i>	<i>Бележка²</i>
<i>Базова организация:</i>	
<i>Институт по минералогия и кристалография „Акад. Иван Костов“ - БАН</i>	
<i>Ръководител на научния колектив</i>	
Проф. д-р Росица Петрова Николова	
<i>Участници:</i>	
Проф. д-р Владислав Владимиров Костов	Учен
Доц. д-р Красимир Стефанов Косев	Учен
Доц. д-р Надя Любомирова Петрова	Учен
Доц. д-р Росица Христова Титоренкова	Учен
Постдокторант Златка Георгиева Делчева	Постдокторант
Студент Гергана Георгиева Велянова	Студент
Студент Катерина Веселинова Михайлова	Студент

¹ Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник като включите и участниците, които са работили по проекта не през целия период за изпълнение на проекта

² Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), или учен от чужбина (УЧ).

Постигнати резултати от изпълнението на проекта и кратък анализ на тяхната приложимост (до 1 стр. в рамките на полето по-долу)

През първите осемнадесет месеца от изпълнението на проекта, следвайки работната програма бяха закупени предвидената приставка за измервания при ниски температури, работна станция и компютърна система, осигурени бяха необходимите реактиви и лабораторни консумативи, проведени бяха изследвания за уточняване на фазите в тройните системи $MgSO_4 (Cl_2, ClO_3, ClO_4) - nOC(NH_2)_2 - mH_2O$; дефинирани бяха методики за получаване на карбамид съдържащи фази чрез кристализация от вода и чрез механохимична активация; изследвани бяха структурните, термични и спектрални характеристики на новите фази и бяха проведени изследвания на фазовите промени на хидрати на магнезиеви соли. В текста по-долу карбамида ($OC(NH_2)_2$) ще бъде отбелязван с „Urea“ за по-прегледно.

За *системата $MgSO_4 - nUrea - mH_2O$* са изработени фазови диаграми, потвърдено е получаването на четири съединения от типа $MgSO_4 \cdot nUrea \cdot mH_2O$, уточнени са условия за получаването им в чист вид и условията за получаване на монокристални образци, описани са термичните и спектрални им характеристики, а за две от тях за първи път са решени кристалните им структури (<https://doi.org/10.3390/cryst14030227>) Дефиниран е продукт, който показва свойства подходящи за използването му в агрохимията и може да бъде получен екологосъобразно (<https://doi.org/10.34049/bcc.55.C.0003>). Изследвани са фазовите превръщания на система от природни магнезиеви сулфати при хидратация и дехидратация (<https://doi.org/10.52215/rev.bgs.2023.84.3.47>). За *системата $MgCl_2 - nUrea - mH_2O$* е изработена фазова диаграма, потвърдено е получаването на четири съединения от типа $MgCl_2 \cdot nUrea \cdot mH_2O$, уточнени са условия за получаването им в чист вид и условията за получаване на монокристални образци, а за две от тях за първи път са решени кристалните им структури. В *системата $Mg(ClO_4)_2 - nUrea - mH_2O$* се получават само две полиморфни модификации на $Mg(ClO_4)_2 \cdot 6Urea$, за които за първи път са определени кристални структури, а в *системата $Mg(ClO_3)_2 - nUrea - mH_2O$* не са получени нови съединения.

Изпълнението на предвидените дейности по проекта даде възможност на един пост-докторант и двама студента да усвоят методи за синтез чрез изпарение и трибохимична активация, да използват аналитична апаратура за физико-химична характеристика на природни и синтетични неорганични материали, да придобият опит за формулиране и осъществяване на научни задачи, както и за интерпретация и публикуване на резултатите. Проектът и получените резултати са представени на три научни форума в страната и един извън страната: XVI Пролетен семинар; „Нови индустрии, дигитална икономика, общество-проекции на бъдещето VI“; „Геонауки 2023“; Summer School on Crystallography“.

С изпълнението на работната програма са постигнати основните цели на проекта, а именно разширяване на познанието за кристалохидратите и комплексите на най-често срещаните в природата магнезиеви соли с данни за поведението на тези съединения в условия различни от тези на Земята повърхност. Създаен е екип от млади учени, които да продължат една от традиционните за ИМК тематики.