

## **АВТОРСКА СПРАВКА ЗА НАУЧНИТЕ ПРИНОСИ**

**на доцент доктор Петър Методиев Рафаилов,**

**Институт по физика на твърдото тяло „Академик Георги  
Наджаков”, Българска академия на науките**

### **Съдържание:**

- I. Творческа биография, включваща сведения за полученото образование, специализации, работа и защитени дисертации;**
- II. Педагогическа дейност –преподаване, обучение на дипломанти и докторанти;**
- III. Други дейности –участие в договори и проекти, участие в конференции, изнесени лекции и доклади и др.**
- IV. Подробно и пълно описание на научните приноси, като ясно се посочат приносите в хабилитационен труд-научни публикации и в научните публикации извън хабилитационния труд**

## I. Творческа биография

Средно образование: Немска езикова гимназия София, 1987 г.

Висше образование:

СУ "Св. Климент Охридски", Физика със специалност "Физика на ядрото и елементарните частици", 1994 г.

- успешно защитена дипломна работа през юни 1994 г. на тема "Раманова спектроскопия на C<sub>60</sub> фулерит", научен ръков. доц. д-р Виктор Хаджиев

-1995 – 1999 г.: редовен докторант във Физически факултет на СУ "Св. Климент Охридски". В рамките на докторантурата: 10-месечна специализация в Технически Университет Берлин под ръководството на проф. Кристиян Томсен

- успешно защитена дисертация за образователната и научна степен "доктор" през ноември 2000 г. на тема "Раманова спектроскопия на фулерени, фулерено-производни съединения и въглеродни нанотръбички", научен ръководител доц. д-р Виктор Хаджиев

- от 1999 г.: назначение на работа като " физик " в Институт по Физика на Твърдото Тяло – БАН. Работа в Лаборатория "Израстване на кристали" под ръководството на проф. д-р Марин Господинов

- Заемани длъжности:

ИФТТ - БАН, н. с. II ст., 2002 - 2005 г.

ИФТТ - БАН, н. с. I ст., 2005 - 2007 г.

ИФТТ - БАН, доцент, 2007 г.

-2000 – 2005 г.: постдок-специализация в Технически Университет (ТУ) Берлин под ръководството на проф. Кристиян Томсен

Научна дейност: над 80 публикации с над 540 установени цитата; h-индекс: 12

Научно-административни отговорности и организационна дейност:

-ръководител Лаборатория „Израстване на кристали“ 2013 – 2016 г.

-ръководител Лаборатория „Физика на материалите и ниските температури“ от 2016 г.

-ръководител направление „Физика на материалите“ от 2013 – 2016 г.

-член на Научния съвет на ИФТТ – БАН от 2012 г.

-Член на организационни комитети на научни форуми: "Light in nanoscience and nanotechnology" (проект ИНЕРА, Хисаря, 2015 г.), и ИНЕРА Workshop-ове "Mobility and knowledge exchange in 2015" и "Postmobility experience sharing" 2016

## **II. Педагогическа дейност**

-водене на упражнения на студенти-първокурсници от инженерните специалности на ТУ Берлин в рамките на Лекционния курс „Въведение във физиката за инженери“ (Einführung in die Physik für Ingenieure) на проф. Кристиан Томсен;

-водене на лабораторно упражнение по Раманова спектроскопия в рамките на „Практикум за напреднали“ (Fortgeschrittenen-Praktikum) за студенти-физици в ТУ Берлин;

-подготовка на двама успешно защитили дипломанти:

1. Михаел Щол, тема „Раманово разсейване от електрохимически легирани въглеродни нанотръбички“ (Ramanstreuung an elektrochemisch dotierten Kohlenstoff-Nanotubes), ТУ Берлин 2004 г. и
2. Стефан Петров, тема „Спектроскопски характеристики на графенови слоеве, получени по метода на химическо отлагане от газова фаза“, Физически факултет на СУ "Св. Климент Охридски" 2014 г.

-подготовка като консултант на един успешно защитил докторант: Вихрен Томов, тема „Израстване и изследване на физични свойства на сложноокисни кристали в системите Pb-Mn-Ni-O, Pb-Mn-Ni-Ti-O и Cu-B-O“, ИФТТ-БАН 2017 г.

## **III. Други дейности –участие в договори и проекти, участие в конференции, изнесени лекции и доклади и др.**

### **Участие в договори и проекти:**

1. NATO Reintegration Grant Nr.CBP.EAP.RIG.982322 2006-2009

2. Договор с фирма Target Instruments, Tennessee, USA, ръководен от проф. Марин Господинов, ИФТТ – БАН.

3. Проекти, финансирани от НФНИ:

Договор с НФНИ - Ръководител

1308/2003 г. - доц. Теодор Миленов, ИФТТ – БАН;

Ф-1207/02 - проф. Марин Господинов, ИФТТ – БАН;

ТК-Х-1715/2007 г. - проф. Людмил Константинов, ИМК – БАН;

D01-835/2007 г. - доц. Мирослав Абрашев, Физически факултет – СУ;

ВУХ308/2007 г. – доц. Димитрина Керина, Югозападен Университет – Благоевград;

ТК-Х-1712/2007 г. – проф. Марин Господинов, ИФТТ – БАН;

ТК-Х 1708/15.12.2007 г. – доц. Лиляна Праматарова, ИФТТ – БАН;

D02-56/2008 г. – доц. Стоян Русев, Физически факултет – СУ;

ТК-02/17.12.2008 г. проф. д-р Георги Високов – Инст. По катализ - БАН

DRNF 02-1/2008 г. – доц. Росица Петрова, ИМК – БАН;

ДФНИ-ТО2/26 – 2014 г. - доц. Вера Маринова, ИОМТ – БАН;

ДФНИ-ТО2/18 – 2014 г. - доц. Йордан Маринов, ИФТТ – БАН;

ДФНИ-Н08/48 – 2016 г. - доц. Юлия Генова, ИФТТ – БАН;

ДН08/9 – 2016 г. - доц. Димитър Димитров, ИФТТ – БАН;

Н28-7/2018 г. - проф. Албена Паскалева, ИФТТ – БАН;

Н28-8/2018 г. - проф. Вера Маринова, ИОМТ – БАН.

ДНТС/Франция/01/10 – проф. Виктор Иванов, СУ "Св. Климент Охридски"

4. Договори с ОИЯИ-Дубна:

01-3-1115-2014/2018 – проф. Николай Тончев, ИФТТ – БАН;

04-4-1133-2018/2020 - доц. Юлия Генова, ИФТТ – БАН.

5. Зам.-ръководител на работен пакет 3 в проекта ИНЕРА (2013-2017 г.) по 7-ма рамкова програма на ЕК.

#### **Участие в конференции:**

1. **P. M. Rafailov**, M. Monev, B. Arnaudov, C. Thomsen, U. Dettlaff-Weglikowska and S. Roth  
Evolution of the Raman intensity and the transport properties of SWNTs in various electrochemical doping stages – exciton effects and functionalization-induced DOS changes

**Poster THU-19, XXIV<sup>th</sup> International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, Kirchberg, Austria, 7-12 March 2010**

2. T. I. Milenov, V. I. Dimov, **P. M. Rafailov** and B. V. Kostova  
Electron Diffraction Study of Two- and Three-dimensional Defects in  $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$  Crystals  
**Poster PD-32, 7<sup>th</sup> BPU General Conference, Alexandroupolis, Greece, 9-13 Sept 2009**
  
3. B. Kostova, T. Milenov, **P. Rafailov**, A. Egorysheva, L. Yankova, M. Veleva, S. Dobрева, V. Skorikov  
Optical Spectroscopy Characterization of Se-doped  $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$  Crystals  
**Poster PD-6, 7<sup>th</sup> BPU General Conference, Alexandroupolis, Greece, 9-13 Sept 2009**
  
4. T.I. Milenov, **P.M. Rafailov**, C. Thomsen, A.V. Egorysheva, R. Titorenkova, L. Yankova, M.N. Veleva, S. Dobрева and V.M. Skorikov  
Raman Spectroscopy Characterization of Se-doped  $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$  Crystals  
**Poster PD-21, 7<sup>th</sup> BPU General Conference, Alexandroupolis, Greece, 9-13 Sept 2009**
  
5. А.В.Егорышева, В.Д.Володин, Т.Миленов, **П.Рафаилов**, В.М.Скорилов, Б.В. Костова  
Рост нелинейно-оптических монокристаллов  $\text{BaBiVO}_4$   
**IX Международная Научная Конференция «ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА: МОНОКРИСТАЛЛЫ, НАНОМАТЕРИАЛЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ», Кисловодск (2009), Россия.**
  
6. **P. M. Rafailov**, J. Maultzsch, C. Thomsen, U. Dettlaff-Weglikowska and S. Roth  
Raman detection of the Kohn anomaly in the K-derived point of the Brillouin zone of metallic carbon nanotubes upon electrochemical doping  
**Poster 5, XXIII<sup>rd</sup> International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, Kirchberg, Austria, 7-14 March 2009**
  
7. T. I. Milenov, **P. M. Rafailov**, G. V. Avdeev, C. Thomsen  
Chemical vapor deposition of carbon layers on Si {001} substrates  
**Poster 1.31, XV International School of Condensed Matter Physics, (2008) Varna, Bulgaria.**
  
8. **P.M. Rafailov**, T.I. Milenov, M. Monev, G.V. Avdeev, C. Thomsen, U. Dettlaff-Weglikowska and S. Roth  
Spectroscopic studies on electrochemically doped and functionalized single-walled carbon nanotubes  
**Poster 2.23, XV International School of Condensed Matter Physics, (2008) Varna, Bulgaria.**
  
9. T.I. Milenov, D. Kerina, **P.M. Rafailov**, M. Veleva, L.Yankova, G.V. Avdeev and M.M. Gospodinov  
Growth and AC- Conductivity Study of  $\text{PbSc}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$  Crystals Doped with La  
**Poster PB-64, Condensed Matter Physics Conference of Balkan Countries, Mugla University, Mugla, TURKEY, 26 - 28 May, 2008**
  
10. T.I. Milenov, **P.M. Rafailov**, M.N. Veleva, S. Dobрева, L. Yankova, G.V. Avdeev and M.M. Gospodinov  
Growth and study of the dielectric properties of  $\text{La}_2\text{CoMnO}_6$  with Double Perovskite Structure  
**Poster PF-25, Condensed Matter Physics Conference of Balkan Countries, Mugla University, Mugla, TURKEY, 26 - 28 May, 2008**
  
11. **P. M. Rafailov**, C. Thomsen, U. Dettlaff-Weglikowska and S. Roth  
Electrochemical Functionalization of SWNT bundles in acid and salt media as observed by Raman and X-ray Photoelectron Spectroscopy

**Poster 39, XXII<sup>nd</sup> International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, Kirchberg, Austria, 1-8 March 2008**

12. **P. M. Rafailov**, C. Thomsen, U. Dettlaff-Weglikowska, B. Hornbostel and S. Roth

*In situ* Raman spectroelectrochemistry on SWNTs at higher doping levels:  
evidence for a transition to intercalative doping

**Poster PTH-36, XXI<sup>st</sup> International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, Kirchberg, Austria, 10-17 March 2007**

13. T. I. Milenov, **P. M. Rafailov**, A.V. Egorysheva, V. M. Skorikov, R. Petrova, M. N. Veleva, T.D. Dudkina, C. Thomsen, A.Ya. Vasil,ev and M.M. Gospodinov

XRD and Raman spectroscopic study of Ru and Os doped Bi<sub>12</sub>SiO<sub>20</sub> crystals

**Poster 2.21, XIV International School of Condensed Matter Physics, (2006) Varna, Bulgaria.**

14. **P. M. Rafailov**, M. Monev, B. Arnaudov, C. Thomsen, U. Dettlaff-Weglikowska and S. Roth  
Evolution of the Raman intensity and the transport properties of SWNTs in various electrochemical doping stages – exciton effects and functionalization-induced DOS changes

**Poster THU-19, XXIV<sup>th</sup> International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, Kirchberg, Austria, 7-12 March 2010**

15. A. G. Petrov, Y. G. Marinov, H. P. Hinov, L. Todorova, M. Dencheva-Zarkova, S. Sridevi, P. M. Rafailov, U. Dettlaff-Weglikowska, „Observation of Flexoelectricity in a Mixture of Carbon Single Walled Nanotubes with a Nematic Liquid Crystal”, 23<sup>rd</sup> International Liquid Crystal Conference ILCC 2010, Jagiellonian University Conference Centre, Kraków, Poland, 11 - 16 July 2010Poster number P-3.139

16. H.Hinov, J.Pavlic, Y.Marinov, A.G.Petrov, S.Sridevi, P.Rafailovand U.Dettlaff-Weglikowska, Influence of carbon single-walled nanotubes (<0.001wt%) and/or a SOPC lipid surface layer (d<0.5 microns) on the behaviour of the gradient flexoelectric domains arising in a homeotropic nematic E-7 layer.16<sup>th</sup> International School on Condensed Matter Physics: Progress in Solid State and Molecular Electronics, Ionics and Photonics, ISCMP XVI, Aug 29<sup>th</sup> – Sep 3<sup>rd</sup>, 2010 Varna, Bulgaria, Poster Presentation, P. 3.5

17. Optical properties of dimeric liquid crystals doped with single-walled carbon nanotubes, Petrov, M.; Katranchev, B. ; Rafailov, P. M.; Naradikian, H.; Dettlaff-Weglikowska, U.; Keskinova, E.  
Conference 17-th ISCMP Location: Varna, BULGARIA Date: SEP 02-07-th, 2012.

18. Chemical vapour deposition growth of graphene layers on metal substrates, Lai, Y.-C.; Yu, S.-C.; Rafailov, P. M.; Vlaikova, E.; Valkov, S.; Petrov, S.; Koprinarova, J.; Terziyska, P.; Marinova, V.; Lin, S. H.; Yu, P.; Chi, G. C.; Dimitrov, D.; Gospodinov, M. M .  
Conference 18-th ISCMP Location: Varna, BULGARIA Date: SEP 01-06-th, 2014.

19. Liquid crystal nanocomposites produced by mixtures of hydrogen bonded achiral liquid crystals and functionalized carbon nanotubes  
Katranchev, B.; Petrov, M.; Keskinova, E.; Naradikian, H.; Rafailov, P. M.; Dettlaff-Weglikowska, U.; Spassov, T.  
Conference 18-th ISCMP Location: Varna, BULGARIA Date: SEP 01-06-th, 2014.

20. Raman Spectroscopy Investigation of the Polar Vibrational Modes in CuB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, Tomov, V., Rafailov, P. M., Yankova, L., Poster P3-9 at Conference Light in Nanoscience and Nanotechnology (LNN 2015), 20-22 October 2015, Hissar, Bulgaria.

21. Graphene Growth on Cu Catalyst, Peter Sveshtarov, Vladimir Mehandzhiev, M. Gospodinov, P. Rafailov, J. Leclerc, D. Dimitrov and B. Blagoev, Poster P1-9 at Conference Light in Nanoscience and Nanotechnology (LNN 2015), 20-22 October 2015, Hissar, Bulgaria.

22. Vertical Nanotube Growth by PECVD, Peter Sveshtarov, Vladimir Mehandzhiev, M. Gospodinov, P. Rafailov, J. Leclerc, D. Dimitrov and B. Blagoev, Poster P1-10 at Conference Light in Nanoscience and Nanotechnology (LNN 2015), 20-22 October 2015, Hissar, Bulgaria.

23. V. Tomov, P. Rafailov, E. Vlaikova, Raman characterization of as grown and transferred graphene synthesized on Ni catalyst, Poster P2.6 at Conference Vapor Phase Technologies for Metal Oxide and Carbon Nanostructures July 6 – 8, 2016 Velingrad, Bulgaria.  
0.333

24. M. Petrov, B. Katranchev, P. Rafailov, The unique physical properties of the hydrogen bonded in dimers liquid crystals, Poster P-14 at INERA Workshop Membrane and Liquid Crystal Nanostructures (MELINA) September 4 – 5, 2016 Varna, Bulgaria.

## **ПЛЕНАРНИ ДОКЛАДИ НА П. М. РАФАЙЛОВ**

**1. *In situ* Раманова спектроскопия на електрохимично легирани снопове от еднослойни въглеродни нанотръбички**

**I-ва Национална работна среща по нови материали:**

**“Физични свойства на оптични, фероелектрични и феромагнитни кристали” (2008) Гьолечица, Рила, България.**

**2. Chemical Vapor Deposition Growth and Characterization of Graphene Layers, на “Low-dimensional materials: theory, modeling, experiment”, July 8-12, 2018 Dubna, Russia.**

**3. “Chemical vapour deposition growth and Raman characterization of graphene layers and carbon nanotubes”, Conference Light in Nanoscience and Nanotechnology (LNN 2015), 20-22 October 2015, Hissar, Bulgaria.**

**4. “Characterization of CVD grown Graphene and Carbon Nanotubes with Raman Spectroscopy”, Conference Vapor Phase Technologies for Metal Oxide and Carbon Nanostructures July 6 – 8, 2016 Velingrad, Bulgaria.**

## IV. Научни приноси в трудовете на Петър Методиев Рафаилов

### A. Научни приноси – хабилитационен труд

(Хабилитационна разширена справка за научните приноси съгласно т. 12 от Забележките в края на Правилника за прилагане на ЗРАСПБ)

Публикации в хабилитационния труд (класификацията по квартали е според SCImago):

A1. Rafailov PM, Bahrs S, Thomsen C. The Raman spectra of MgB<sub>2</sub> and its potential impurity phases. *Phys Status Solidi B Basic Res* 2001;226(2), R9-R11. Q2

A2. Rafailov PM, Dworzak M, Thomsen C. Luminescence and Raman spectroscopy on MgB<sub>2</sub>. *Solid State Commun* 2002;122(7-8):455-8. Q1

A3. Milenov TI, Rafailov PM, Egorysheva AV, Skorjkov VM, Petrova R, Veleva MN, Dudkina TD, Thomsen C, Vasil'ev AY, Gospodinov MM. XRD and Raman spectroscopic study of Ru and Os doped Bi<sub>12</sub>SiO<sub>20</sub> crystals. *J Optoelectron Adv Mat* 2007;9(2):293-5. (удостоверение от кореспонд. автор за съществен принос) Q2

A4. Rafailov PM, Thomsen C, Dettlaff-Weglikowska U, Hornbostel B, Roth S. Raman spectroelectrochemistry on SWNTs at higher doping levels: Evidence for a transition to intercalative doping. *Phys Status Solidi B Basic Res* 2007;244(11):4060-3. Q2

A5. Rafailov PM, Egorysheva AV, Milenov TI, Volodin VD, Avdeev GV, Titorenkova R, Skorikov VM, Petrova R, Gospodinov MM. Synthesis, growth and optical spectroscopy studies of BaBiBO<sub>4</sub> and CaBi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>O<sub>7</sub> crystals. *Appl Phys B* 2010;101(1-2):185-92. Q1

A6. Petrov M, Katranchev B, Rafailov PM, Naradikian H, Dettlaff-Weglikowska U, Keskinova E, Spassov T. Phases and properties of nanocomposites of hydrogen-bonded liquid crystals and carbon nanotubes. *Phys Rev E Stat Nonlinear Soft Matter Phys* 2013;88(4), 042503. (удостоверение от кореспонд. автор за съществен принос) Q1

A7. Lai Y.-C., Yu S.-C., Rafailov\* PM, Vlaikova E, Valkov S, Petrov S, Koprinarova J, Terziyska P, Marinova V, Lin, S. H., Yu, P., Chi, G. C., Dimitrov D, Gospodinov MM. Chemical vapour deposition growth of graphene layers on metal substrates. *J Phys Conf Ser* 2014;558(1), 012059.

\*(кореспондиращ автор); без IF, със SJR

A8. Lai Y.-C., Rafailov\* PM, Vlaikova E, Marinova V, Lin SH, Yu P, Yu S-, Chi GC, Dimitrov D, Sveshtarov P, Mehandjiev V, Gospodinov MM. Chemical vapour deposition

growth and Raman characterization of graphene layers and carbon nanotubes. J Phys Conf Ser 2016;682(1), 012009.

\*(кореспондиращ автор); без IF, със SJR

A9. Rafailov, P.M., Todorov, R., Marinova, V., Dimitrov, D.Z., Gospodinov, M.M, Optical spectroscopic study of Ru and Rh doped Bi<sub>12</sub>TiO<sub>20</sub> crystals, Bulgarian Chemical Communications 51, Issue 2, 2019, Pages 219-223. Q4

A10. S. Petrov, P. M. Rafailov\*, V. Marinova, S. H. Lin, Y.-C. Lai, P. Yu, G. C. Chi, D. Dimitrov, D. Karashanova, and M. Gospodinov, Chemical vapor deposition growth of bilayer graphene via altering gas flux geometry", Thin Solid Films 690, 137521 (2019).

\*(кореспондиращ автор) Q2

Общо 187 т.

*Въведение:* Рамановото разсейване представлява селективно прехвърляне на енергия и импулс от възбуждащо лъчение върху квазичастици в материята като електрони, фонони, магнони и др. Тъй като взаимодействието с възбуждащото лъчение се осъществява предимно от електронната система на материята, взаимодействието на електроните с останалите квазичастици прави Рамановата спектроскопия особено ценен метод за цялостно изследване свойствата на материята във видимата, близките инфрачервена и ултравиолетова област. Това се дължи и на сравнително простата реализация на метода в лабораторни условия, достъпността до високочувствителни оптични детектори и голямата роля на симетрията в Рамановата спектроскопия, което дава възможност тя да се използва за сравнителен метод при определяне на структури. При високотемпературни свръхпроводници могат да се определят параметри на електрон-фононното взаимодействие, параметри на фазовия преход и критичната температура. Към метода може да се комбинира поставяне на пробите в електрични и магнитни полета, уреди за *in situ* обработка на пробите – възможност за детектиране на фазови преходи от втори род, изследвания на свойствата на двумерния електронен газ в тънки слоеве от полупроводници, изследване влиянието на химично и електрохимично легиране върху електронните свойства на пробите.

Особено голямо значение придоби Рамановата спектроскопия с навлизането на нискоразмерните системи във фокуса на научните изследвания. Поради явлението *quantum confinement* зонната структура на тези системи създава разнообразни условия за генериране на резонанси. Рамановото разсейване протича в условия на резонанс, когато енергията на възбуждащите фотони доближи или стане равна на ширината на забранената зона в полупроводник, или по-общо – енергетичния интервал между два максимума в плътността на състоянията съответно във валентната зона и зоната на проводимост. Тъй като матричните елементи на електронните диполни преходи влизат на четвърта степен в израза за Рамановия интензитет, при резонанс той рязко нараства и това дава възможност с резонансна Раманова спектроскопия да се изследват детайли от зонната структура. Това прави метода особено ценен и предпочитан за изследвания на нискоразмерни системи и

наноразмерни обекти като тънки слоеве, едностенни и многостенни нанотръбички, квантови точки и др., не на последно място поради възможността в комбинация с микроскоп да се постигне пространствена разделителна способност до 500 нм. С това Рамановата спектроскопия става един от водещите изследователски методи в нанотехнологиите.

Библиография:

[1] D. L. Rousseau, R. P. Bauman, S. P. S. Porto, Normal mode determination in crystals, *Journal of Raman Spectroscopy* 10 (1981) pp. 253-290.

[2] L. Kavan, P. Rapt, L. Dunsch, M.J. Bronikowski, P. Willis, R. Smalley, *J. Phys. Chem. B* 105 (2001) 10764.

[3] Alberto Sanchez-Castillo, Mikhail Osipov, Frank Giesselmann, Orientational order parameters in liquid crystals: a comparative study of X-ray diffraction and polarized Raman spectroscopy results, *Physical Review E* 81 (2010) 021707.

### **Тема №1.** Раманова спектроскопия на $MgB_2$ . (Публикации A1 и A2).

Проведен е детайлен спектроскопичен анализ на свръхпроводника  $MgB_2$  и неговите евентуални примесни фази. Установено е, че вибрационният мод при  $600\text{ cm}^{-1}$ , чиито произход беше спорен поради голямата ширина на спектралната линия, е  $E_{2g}$ -модът на  $MgB_2$ , които според мнозинството от изследователите на  $MgB_2$  е отговорен за свръхпроводимостта до около 40 K в този материал поради изключително силното си взаимодействие с електронната система. По-нататък ние установихме, че интензивният фон, на който е стъпила  $E_{2g}$ -линията и който значително допринася за нейната ширина, представлява в преобладаващата си част луминесценция, а не електронно Раманово разсейване, както беше предполагано дотогава от някои автори. Нашите изследвания върху честотното отместване и ширината на  $E_{2g}$ -линията между стайна температура и 4 K дадоха допълнително потвърждение за силната анхармоничност на този мод и интензивното му взаимодействие с електроните.

**Тема №2** Раманова диагностика на качествено ниво за дефекти в тримерни монокристали. (Публикации A3 и A9).

Използвана е поляризирана Раманова спектроскопия като бърз и неразрушителен метод за качествено установяване на присъствието на структурни дефекти в легирани кристали от  $Bi_{12}SiO_{20}$  и, като резултатите са потвърдени с рентгеново-дифракционни методи. Получени са индикации, че дефектите, обуславящи в  $Bi_{12}SiO_{20}$ -слитъци т. нар. „централен стълб” - основен структурен дефект в кристали от  $Bi_{12}MO_{12}$  ( $M = Ge, Si, Ti$ ), са дефекти на опаковка. В корелация с рентгеновите данни за такива дефекти са открити аномални промени в отношението на Рамановите интензитети

на трансверзалните и лонгитудиналните компоненти на трикратно изродените модове, чрез което са установени локални промени в силата на далекодействащите взаимодействия, дължащи се на спорадично наличие в решетката на собствен йон с аномална валентност (напр.  $\text{Bi}^{5+}$ ). Изследвани са ефектите от легирането на  $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$  с Ru и Os и на  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  с Ru и Rh върху образуването на структурни дефекти в кристалите и върху баланса между близко- и далеко-действащите взаимодействия в тях и е установено противоположно влияние на рутения, дължащо се вероятно на различно негово разпределение по оксидационни степени.

**Тема №3** Раманова спектроскопия на електрохимично поляризирани въглеродни нанотръбички при високи потенциали. (Публикация А4).

Осъществен е Раманова спектроскопия на електрохимично легирана (зареждана) тъкан от агломерирани снопове въглеродни нанотръбички, използвана като работен електрод във воден разтвор на хлорид в електрохимична клетка. Докато при ниски потенциали честотата на Рамановите ивици зависи линейно от инжектирания заряд и електролитните йони образуват зареден двоен слой само с общата външна повърхност на сноповете, при потенциал над 1 V се наблюдава стръмно нарастване на честотата и качествени промени в ивиците, съпроводени с протичане на силен ток: Това е индикация за начало на Фарадееви процеси и интеркалация на хлоридни радикали във вътрешността на сноповете от въглеродни нанотръбички. В линейната област честотите и формата на спектралните ивици са стабилни и тенденцията е обратима чрез подходяща смяна в знака на приложения потенциал за разлика от интеркалацията, където промените в честотите и формата на спектралните ивици не винаги са напълно обратими, което говори за електрохимична функционализация.

**Тема №4** Раманова спектроскопия на кристалите  $\text{BaBiVO}_4$  и  $\text{CaBi}_2\text{B}_2\text{O}_7$ . (Публикация А5).

Проведен е пълен групово-теоретичен анализ и са измерени Раманови спектри във всички значими поляризационни геометрии на кристалите  $\text{BaBiVO}_4$  и  $\text{CaBi}_2\text{B}_2\text{O}_7$ . Въз основа на получените резултати и от сравнение с инфрачервени спектри на пропускане са определени симетриите на голяма част от фононите в центъра на зоната на Брилуен за двата кристала. Преодолян е проблемът, който микродвойникуването в тези кристали създава при разграничаването на  $\text{B}_1$  от  $\text{B}_2$  фононите. И за двата материала е установено, че нискочестотната част от техните вибрационни спектри ( $0\text{--}350\text{ cm}^{-1}$ ) съдържа предимно вибрации на  $\text{Bi-O}$  полиедрите, докато високочестотната (част  $580\text{--}1400\text{ cm}^{-1}$ ) е доминирана от вибрациите на  $\text{VO}_3$  триъгълниците, които присъстват като отделни йонни групи в

кристалната структура. Анализирани са и Давидовото разцепване на вибрационните модове, възникващо поради разположението на тези триъгълници в слоеве.

**Тема №5** Раманова спектроскопия на течнокристален нанокомпозит на основата на течния кристал 7OBA и въглеродни нанотръбички. (Публикация А6).

Изследван е нанокомпозит, изграден от смес на димерния течен кристал (ТК) 7OBA с едностенни въглеродни нанотръбички (ЕСВНТ). С Раманова спектроскопия са проследени нови, нетипични за ахиралния ТК 7OBA като хирални и реентрант фази, като хирален нематик, хирален смектик С, реентрант хирален нематик, както и теоретично предсказания за ниско-молекулни ТК системи от De Gennes, фероелектричен смектичен С (СГ) ТК. Селектиран е вибрационен мод на 7OBA молекулата, който характерно повишава Рамановия си интензитет в смектичната фаза. Присъствието на ЕСВНТ в нанокомпозита е доказано от наличието на сигнал от високочестотното трептене на въглеродните шестоъгълници. Получена е индикация за взаимодействието на стените на нанотръбичните с ТК молекули чрез детектирането на втвърдяване на честотата на радиално-дишащия мод на ЕСВНТ спрямо стойността ѝ в чисти ЕСВНТ.

**Тема №6** Раманова спектроскопия на графен. (Публикации А7, А8 и А10).

Слоеви от графен са получени чрез химическо отлагане в газова фаза (CVD) върху изолиращи (Si/SiO<sub>2</sub>) с интерфейсен слой от Ni, както и директно върху подложка от медно фолио и характеризирани с Раманова спектроскопия. Различени са многослоен от еднослоен графен и са дискутирани режимите за оптимално израстване, както и природата на дефектите в словете. Вертикално израстнали многостенни нанотръбички бяха получени в режима с плазмено стимулиране. Поради различната хиралност на отделните слоеве дефектно-индуцираната ивица в техния Раманов спектър е много по-интензивна.

След оптимизиране на режима на израстване за едрозърнест еднослоен графен газовия поток на CVD реагентите беше допълнително пертурбиран чрез поставяне на различни приспособления в близост до подложката. Установено е, че тези модификации водят до увеличено образуване на двуслоен графен с различни ъгли на разориентация, индикация за което е втвърдяването на честотата на 2D Raman ивицата по отношение на тази на еднослойния графен. Масираното образуване на двуслоен графен е допълнително потвърдено чрез сканираща и трансмисионна електронна микроскопия, атомно-силова микроскопия, както и измерване на оптичното пропускане. По този начин се създават възможности за контрол на броя на

слоеве в CVD израстването на графен чрез манипулиране на геометрията на газовия поток.

## **В. Приноси в научни публикации извън хабилитационния труд:**

Публикации извън хабилитационния труд (класификацията по квартали е според SCImago):

B1. T. I. Milenov, P.M. Rafailov, C. Thomsen, A.V. Egorysheva, R. Titorenkova, L.Yankova, M.N. Veleva, S. Dobreva and V.M. Skorikov, Raman spectroscopy characterization of Se-doped Bi<sub>12</sub>SiO<sub>20</sub> crystals. AIP conference proceedings 1203 (2010) p. 228. Без IF, със SJR

B2. Milenov TI, Rafailov PM, Abrashev MV, Nikolova RP, Nakatsuka A, Avdeev GV, Veleva MN, Dobreva S, Yankova L, Gospodinov MM. Growth and characterization of La<sub>2</sub>CoMnO<sub>6</sub> crystals doped with Pb. Mater Sci Eng B Solid State Adv Technol 2010;172(1):80-4. Q2

B3. Egorysheva AV, Volodin VD, Milenov T, Rafailov P, Skorikov VM, Dudkina TD. Glass formation in the CaO-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and SrO-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> systems. Russ J Inorg Chem 2010;55(11):1810-7. Q4

B4. Hinov HP, Pavlič JI, Marinov YG, Petrov AG, Sridevi S, Rafailov PM, Dettlaff-Weglikowska U. Influence of single-walled carbon nanotubes (< 0.001 wt %) and/or zwitter-ionic phospholipid (SOPC) surface layer on the behaviour of the gradient flexoelectric and surface induced polarization domains arising in a homeotropic E7 (a mixture of 5CB, 7CB, 8OCB and 5CT) nematic layer. J Phys Conf Ser 2010;253, 012061. Без IF, със SJR

B5. Avdeev GV, Milenov TI, Egorysheva AV, Petrov KP, Skorikov VM, Titorenkova RK, Rafailov PM. Crystal structure of Bi<sub>36</sub>MgP<sub>20</sub>O<sub>60</sub>-δ. Russ J Inorg Chem 2011;56(6):913-8. Q4

B6. Milenov TI, Rafailov PM, Thomsen C, Egorysheva A, Titorenkova R, Kostova B, Skorikov V. Raman and optical spectroscopy characteristics of Se-doped Bi<sub>12</sub>SiO<sub>20</sub> crystals. Opt Mater 2011;33(11):1573-7. Q2

B7. Egorysheva AV, Volodin VD, Berezovskaya IV, Zubar' EV, Skorikov VM, Milenov T, Rafailov P. Effect of Eu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> doping on the crystallization behavior of BaO-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> glasses. Inorg. Mater. 2012;48(9):948-52. Q3

B8. Milenov TI, Rafailov PM, Urcelay-Olabarria I, Ressouche E, García-Muñoz JL, Skumryev V, Gospodinov MM. Magnetic behavior of La<sub>2</sub>CoMnO<sub>6</sub>-δ crystal doped with Pb and Pt. Mater Res Bull 2012;47(12):4001-5. Q1

B9. Dimitrov D, Marinova V, Tomov V, Rafailov P, Gospodinov M. Crystals growth of topological insulators in  $\text{Bi}_2(\text{SexTe}_{1-x})_3$  system. *Bulg Chem Commun* 2013;45 (SPEC. ISSUE B):226-8. Q4

B10. Yankova L, Milenov TI, Rafailov PM, Avdeev GV, Veleva MN, Gospodinov MM. Magnetic and electric field characterization of  $\text{La}_2\text{CoMnO}_6$  crystals doped with Pb. *Cryst Res Technol* 2013;48(7):439-45. Q2

B11. Katranchev B, Petrov M, Keskinova E, Naradikian H, Rafailov PM, Dettlaff-Weglikowska U, Spassov T. Liquid crystal nanocomposites produced by mixtures of hydrogen bonded achiral liquid crystals and functionalized carbon nanotubes. *J Phys Conf Ser* 2014;558(1), 012024. Без IF, със SJR

B12. Egorysheva AV, Milenov TI, Ellert OG, Avdeev GV, Rafailov PM, Efimov NN, Novotortsev VM. Magnetic glass-ceramics containing multiferroic  $\text{BiFeO}_3$  crystals. *Solid State Sci* 2015;40:31-5. Q2

B13. Terziyska PT, Butcher KSA, Rafailov P, Alexandrov D. Growth of vertically oriented  $\text{InN}$  nanorods from In-rich conditions on unintentionally patterned sapphire substrates. *Appl Surf Sci* 2015;353:103-5. Q1

B14. Katranchev B, Petrov M, Rafailov PM, Todorov N. Chiralization and ferroelectric state induction in nanostructured liquid crystals. *J Phys Conf Ser* 2016;682(1), 012001. Без IF, със SJR

B15. Tomov V, Rafailov PM, Yankova L. Raman spectroscopy investigation of the polar vibrational modes in  $\text{CuB}_2\text{O}_4$ . *J Phys Conf Ser* 2016;682(1), 012028. Без IF, със SJR

B16. Katranchev B, Petrov M, Rafailov P, Todorov N, Keskinova E, Naradikian H, Spassov T. Ferroelectric state induced in mixture of dimer liquid crystal and perfluorooctanoic acid. *Mol Cryst Liq Cryst* 2016;632(1):21-8. Q2

B17. Tomov V, Rafailov PM, Luo C-. Growth, composition, ferroelectric and magnetic properties of new multiferroic  $\text{Pb}_{3.3}\text{Mn}_{4.8}\text{Ni}_{1.1}\text{Ti}_{0.56}\text{O}_{15.3}$  single crystals. *Cryst Res Technol* 2016;51(7):446-52. Q2

B18. Petrov M, Katranchev B, Rafailov P. Induction of chiral phases in originally achiral hydrogen-bonded dimer liquid crystals. *Mol Cryst Liq Cryst* 2016;641(1):95-105. Q2

B19. Dimitrov, D. Z., Rafailov, P. M., Chen, Y. F., Lee, C. S., Todorov, R., Juang, J. Y.. Growth and characterization of  $\text{LuVO}_4$  single crystals. *Journal of Crystal Growth*, 473, Elsevier, 2017, 34. Q2

B20. Dimitrov, D., Rafailov, P., Marinova, V., Babeva, T., Goovaerts, E., Chen, Y. F., Lee, C. S., Juang, J. Y.. Structural and optical properties of  $\text{LuVO}_4$  single crystals. *Journal of Physics: Conf. Series*, 794, IOP Publishing, 2017, 012029. Без IF, със SJR

B21. Petrov, M, Katranchev, B, Rafailov, P. The unique physical properties of the hydrogen bonded in dimers liquid crystals. Journal of Physics: Conf. Series, 780, 2017, 012012. DOI:10.1088/1742-6596/780/1/012012. Без IF, със SJR

B22. Egorysheva, A. V., Milenov, T. I., Rafailov, P. M., Gaitko, O. M., Avdeev, G. V., Dudkina, T. D.. Optical and Vibrational Spectra of Bi<sub>1.8</sub>Fe<sub>1.2</sub>(1 - x)Ga<sub>1.2x</sub>SbO<sub>7</sub> Solid Solutions with Pyrochlore-Type Structure. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 62, 7, Pleiades Publishing, Ltd., 2017, 960. ISI IF:0.787. Q3

B23. Koduru, H. K., Scarpelli, F., Marinov, Y. G., Hadjichristov, G. B., Rafailov, P. M., Miloushev, I. K., Petrov, A. G., Godbert, N., Bruno, L., Scaramuzza, N.. Characterization of PEO/PVP/GO nanocomposite solid polymer electrolyte membranes: microstructural, thermo-mechanical, and conductivity properties. Ionics, 24, 11, Springer, 2018, DOI:https://doi.org/10.1007/s11581-018-2484-8. Q1

B24. M Petrov, P Rafailov, H Naradikian, B Katranchev, N Todorov. Graphene-induced bi-tilted two component smectic CG phase with bulk ferroelectricity in hydrogen-bonded dimer liquid crystals. Journal of Molecular Liquids, 272, (2018) pp. 97-105. Q1

B25. Genova, J., Petrov, M., Bivas, I., Rafailov, P., Naradikian, H., Katranchev, B.. Fourier-transform Infrared and Raman characterization of bilayer membranes of the phospholipid SOPC and its mixtures with cholesterol., Coll. Surf. A, 557 (2018) 85-93. Q2

B26. Marinov, Y. G., Hadjichristov, G. B., Rafailov, P. M., Lin, S. H., Marinova, V., Petrov, A. G.. Optical, electro-optical, electrical and dielectric characterization of nematic liquid crystal (E7) layers doped with graphene nanoparticles for electro-optics. Journal of Physics: Conference Series, 1186, 1, Institute of Physics Publishing, 2019, ISSN:1742-6588, DOI:10.1088/1742-6596/1186/1/012031, 012031. Без IF, със SJR

Общо 426 т. **Общо А + В са 613 точки**

**Тема №1.** Раманова спектроскопия на бисмутов силикат, легиран със селен и силенито-подобни кристални фази. (Публикации В1, В5 и В6).

Кристали от Bi<sub>12</sub>SiO<sub>20</sub> легираны със селен при две концентрации на легиращия примес са получени по метода на Чохралски. Установено е, че легирането протича в тетраедричните позиции и следва схемата (Se<sup>6+</sup> + 2Fe<sup>3+</sup>) → 3Si<sup>4+</sup>. Докато ниската концентрация на Se не причинява значими промени на вибрационните характеристики, легирането с висока концентрация води до: значително потискане на А-фонона на 145 cm<sup>-1</sup>; понижение на честотата с 2 - 5.5 cm<sup>-1</sup> на всички фонони и появата на трептения от т.нар. [BiO3E] групи, които произлизат от деформиране на тетраедрите. Приема се, че това се дължи на значително увеличение на

параметъра на решетката и на допълнително заместване на значително количество [SiO<sub>4</sub>] тетраедри от [BiO<sub>3</sub>E] групи.

Синтезирано е съединението Bi<sub>36</sub>MgP<sub>2</sub>O<sub>60-δ</sub> и е уточнена структурата му като кубична тип силенит. Уточнени са и основните трептения с ИЧ и Раманова спектроскопия. Рамановият спектър на съединението съдържа предимно интензивни линии от трептенията на Bi–O полиедриите и по-слаби пикове от високочестотните трептения на [MO<sub>4</sub>] тетраедриите. Спектърът завършва с напълно симетричното [PO<sub>4</sub>]<sup>3-</sup> трептене на 906 cm<sup>-1</sup>.

**Тема №2** Раманови изследвания на La<sub>2</sub>CoMnO<sub>6</sub> кристали. (Публикации В2, В8 и В10).

Кристали на двойния перовскит La<sub>2</sub>CoMnO<sub>6</sub>, легирани с различни концентрации на олово, платина, както и с комбинации от двете са хазактеризирани с магнитни измервания, рентгенова дифракция и Раманова спектроскопия. Според експериментално определените фононни симетрии от Рамановите спектри структурата на част от кристалите, легирани с Pb могат да се разглеждат като смес от орторомбична фаза (без подреждане на Co / Mn) и моноклинична фаза (с далечно Co<sup>2+</sup>/Mn<sup>4+</sup> подреждане). В друга част е установена преобладаващо подредена Co<sup>2+</sup>/Mn<sup>4+</sup> структура със статистически равномерно разпределен Mn<sup>3+</sup>, заместващ Co<sup>2+</sup> йоните. Измервания на постоянно-токовата проводимост на тези кристали показват, че преносът на заряд в областта 180- 350K се определя от прескачане на малки поларони.

Магнитни измервания на кристал с композиция La<sub>1.67</sub>Pb<sub>0.33</sub>Co<sub>0.90</sub>Mn<sub>1.05</sub>Pt<sub>0.05</sub>O<sub>(6-d)</sub> (легиран с Pb и Pt дериват на двойния перовскит La<sub>2</sub>CoMnO<sub>6</sub>) сочат наличие на подредена по Co<sup>2+</sup> и Mn<sup>4+</sup> йоните фаза, което се потвърждава и от измерената намагнитеност на насищане от 6,4 μ<sub>B</sub>/ f.u. Известно количество Mn<sup>3+</sup> йони в Co позиции, разпределени хаотично в решетката, също допринасят за тази висока стойност, но затрудняват определянето на структурата ѝ с рентгенова дифракция, според която орторомбичната *Pnma* и моноклинната *P2<sub>1</sub>n* структури са равновероятни. Затова се провеждат и изследвания с поляризирана Раманова спектроскопия, които потвърждават заключението за моноклинна структура.

**Тема №3** Раманова спектроскопия на сложно-оксидни стъкла и стъклокерамики. (Публикация В3, В7, В12 и В22).

Локалната структура на стъкла в системите 10SrO–xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–(90 – x) V<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, (45 – x)SrO–xBi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–55V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и xSrO–15Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–(85 – x)V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> е изследвана с Раманова спектроскопия. Установено е, че [VO<sub>3</sub>] групите преобладават при малки съдържания на V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в стъклата, докато делът на тези групи е значително по-нисък в богатите на V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> проби, в чиито Раманови спектри най-интензивни са линиите, съответстващи на вибрациите на [VO<sub>4</sub>] групите.

С увеличаване съдържанието на борен оксид линиите в Рамановите спектри се разширяват поради структурното разнообразие на боратните аниони, които образуват стъклената мрежа. От изследвания на калциеви и стронциеви стъкла със сходен състав е установено също така, че съотношението  $[\text{BO}_3]/[\text{BO}_4]$  не зависи от алкалоземния елемент. Легиране на бариеви стъкла с  $\text{Eu}_2\text{O}_3$  води до образуване на смесени окисни кристалити от вида  $\text{Bi}_{2-x}\text{Eu}_x\text{O}_3$ . Синтезирана е нова композитна стъклокерамика, съдържаща  $\text{BiFeO}_3$  кристалити и е показано, че тя има предпочитана посока на дендритен растеж, т.е. има анизотропни свойства. Синтезирана е серия от твърди разтвори в системата  $\text{Bi}_{1.8}\text{Fe}_{1.2(1-x)}\text{Ga}_{1.2x}\text{SbO}_7$ . При всички тях е установен силен структурен безпорядък, проявяващ се в наличието в Рамановите спектри на широки спектрални ивици вместо тесни фононни линии.

**Тема №4** Изследване на ефектите от легиране на нематичния течен кристал E7 с въглеродни нанотръбички (Публикации B4 и B26).

Принос в определяне на оптималната концентрация на въглеродните нанотръбички, доказване на хомогенното им разпределение в течния кристал (ТК) и в обяснението на взаимодействието им с ТК. Раманова характеристика на нематичната фаза на чист E7 и на E7 легиран с графенови наночастици в различни концентрации.

**Тема №5** Раманова спектроскопия на кристали от системата  $\text{Bi}_2(\text{Se}_x\text{Te}_{1-x})_3$  и на наностълбове от  $\text{InN}$ . (Публикации B9 и B13).

Изследвани са монокристали със свойства на топологичен изолатор в системата  $\text{Bi}_2(\text{Se}_x\text{Te}_{1-x})_3$  при различни стехиометрични съотношения. Анализирани са честотните отмествания на вибрационните модове в различните проби в зависимост от промените в стехиометрията и състава, както и на параметъра на решетката. Установено е наличие на смесено едномодово и двумодово поведение при плавно променяне на композицията от  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  към  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . От честотите и разпределението на вибрационните модове в Рамановия спектър на вертикално израстнати наностълбове от  $\text{InN}$  върху сапфирена подложка е установена хексагонална структура на  $\text{InN}$  наностълбовете в потвърждение на резултата от характеристиката им с рентгенова дифракция.

**Тема №6** Раманова спектроскопия на течнокристални (ТК) нанокompозити на основата на  $n\text{OBA}$ . (Публикации B11, B14, B16, B18, B21 и B24).

Използвайки оптимална концентрация на въглеродни нанотръбички (ВНТ), функционализирани с карбоксилни групи в димерния ТК 8ОВА, ние откриваме процес на хирализация на иначе ахиралния в чисто състояние ТК 8ОВА. Функционализираните ВНТ слабо намаляват закотвянето на повърхността, но благоприятстват обемното подреждане на ТК и процеса на хирализация. Използвайки легирани на димерни ТК nОВА с различни немезогенни компоненти като чисти и функционализирани ВНТ, перфлуорооктаноева киселина (PFOA), графенови нанолъспи (ГрНл) и др. се наблюдава каскада от фазови преходи, водещи в крайна сметка до фероелектричното триклинно състояние  $C_G$ , като степента на неговото проявление зависи от немезогенния компонент – от напълно развита  $C_G$  фаза при ВНТ и ГрНл до  $C_G$  фаза в латентно състояние при PFOA. Специално  $\pi$ - $\pi$  взаимодействието на димерния и бифенилния пръстени на течния кристал с въглеродните хексагони на графеновия слой води до образуването на двукомпонентна  $C_G$  фаза, в която се проявяват различни комбинации на т.нар. двоен смектичен наклон на ТК молекули.

**Тема №7** Използване на симетрийните свойства на Рамановия ефект за изясняване на елементи от вибрационния спектър на кристали. (Публикации В15, В19 и В20).

Снети са поляризирани Раманови спектри на монокристали  $CuV_2O_4$  в различни конфигурации на разсейване, зависими от ъглите на въртене по отношение на основните кристални оси. Различната ъглова зависимост на интензивността на разсейване на фононите с различни симетрии ни позволи да проверим принадлежността един към друг на TO/LO компонентите на няколко полярни фонона и да потвърдим честотите на някои ниско-интензивни TO компоненти с Раманова спектроскопия. С цел преодоляване на затруднения в идентифицирането на някои Раманови фонони в  $LuVO_4$  с близки честоти, различни симетрии и огромни разлики в сечението на разсейване беше приложен нов подход с измерване на Раманови спектри при различна ориентация на завъртане на кристалите в равнината на поляризация на възбуждащия лазер. Посредством зависимостта на Рамановия интензитет от ъгъла на завъртане бяха определени позициите и симетриите на три слабо разсейващи фонона, за чиято идентификация досега бяха докладвани противоречиви данни в научната литература. С това е приключена идентификацията на 11 от 12-те Раманово активни фонона в  $LuVO_4$ .

**Тема №8** Температурно-зависима Раманова спектроскопия и проследяване на фазов преход в сложно-окисен кристал. (Публикация В17).

Изследвани са фероелектрични монокристали от системата Pb-Mn-

Ni-Ti-O. При около 430 K рязка аномалия на диелектричната константа в кристала  $Pb_{3.3}Mn_{4.8}Ni_{1.1}Ti_{0.56}O_{15.3}$  индикира възможен фазов преход параелектрик-фероелектрик. Промяна в температурния градиент на константата на решетката по оста с и аномалия в Рамановите спектри при температури в околността на 430 K допълнително потвърждават този фазов преход. Близо до 430 K Рамановата линия на  $127\text{ cm}^{-1}$  прекъсва нормалната си тенденция на омекотяване на честотата при повишение на температурата, като се наблюдава един лек скок към по-високи честоти, след което над 430 K отново се подновява омекотяващата тенденция с едва забележима промяна в честотния градиент. Това поведение е характерно за процес на пренареждане в кристалната решетка. Тъй като силовите константи на фононите зависят от разпределението на зарядите, тези скокообразни промени във вибрационните честоти предполагат пренареждане на заряди, съвместимо с наблюдаваната промяна в поляризируемостта.

**Тема №9** Раманова спектроскопия на мембрани от PEO/PVP/NaIO<sub>4</sub>/GO. (Публикация В23).

Мембрани от твърдотелния полимерен електролит PEO/PVP/NaIO<sub>4</sub> бяха легирани с графенов оксид (GO) и характеризирани с Раманова спектроскопия. Легирането на PEO/PVP/NaIO<sub>4</sub> мембраната с GO води до потискане на всички характерни Раманови ивици в спектрите на полимерите PEO и PVP. Увеличението на съотношението на Рамановите интензитети (I(D)/I(G)) на дефектно-индуцираната D ивица и нормалната G ивица показва понижаване на размера на GO кристалитите, което говори за успешно включване и добро разпределение на нано-листове GO в полимерната мембрана.

**Тема №10** Раманова и инфрачервена спектроскопия на фосфолипида SOPC при различни концентрации на добавен холестерол. (Публикация В25).

Добавянето на холестерол към липиден слой от 1-стеароил-2-олеоил-sn-глицерол-3-фосфохолин (SOPC) е изследвано с Раманова и инфрачервена спектроскопия. Идентифицирани са ивиците в спектрите на липида, които най-чувствително реагират на взаимодействията на холестерола с фосфатните и холиновите групи на хидрофилната глава, с карбонилните естерни групи на полярно-аполярния интерфейс и на конформационното състояние на хидрофобните вериги в частично хидратирани двуслойни мембрани от липида SOPC. Наблюдаваните ефекти в спектрите говорят за подреждащ ефект на холестерола върху липидния двоен слой, като ефектът е по-силен при вътре-верижното подреждане, изразяващо се в стабилна тенденция на намаляване на отношението между gauche/trans изомерите при нарастващо

съдържание на холестерол. При вмъкване на холестеролни молекули в двуслойната липидна мембрана те участват в образуването на водородни връзки с карбонилните групи и при увеличаване на концентрацията си дори изместват водата от някои такива връзки. Едновременно с това процесът на образуване на водородни връзки на карбонилните групи с водата остава активен и се улеснява от повишаването на холестеролната концентрация. В полярната глава увеличение в съдържанието на холестерол улеснява свързването на водата чрез водородни връзки към PO<sub>2</sub>- групата, а се намаляват връзките на водни молекули с холиновата група вероятно поради конформационните промени, които холестеролът налага върху липидния двоен слой.