

РЕЦЕНЗИЯ

Върху дисертационен труд за получаване на образователна и научна степен “ДОКТОР” по научната специалност **01.05.01 Теоретична химия**.

Автор на дисертационния труд: **Веселин Людмилов Колев**, редовен докторант в катедра Инженерна химия в Химическия факултет на СУ.

Тема на дисертационния труд: **Влияние на електролити върху адсорбцията и миещото действие на йонни повърхностно активни вещества**.

Рецензент: **Боян Пенков Радоев, професор, дхн, катедра физикохимия, СУ**

Представенияят ми за рецензия труд, съдържа 221 машинописни страници, 40 фигури и 15 таблици; пълният брой цитирани източници е 247. Изложението на дисертацията е построено върху увод, описващ както съдържанието, така и някои наукометрични данни (списък на публикациите, забелязани цитати, участие в научни форуми). Следват 6 глави и прилежащо резюме “Най-важни приноси в дисертацията”. Всички останали по-важни данни ще бъдат отбелязани в съответните точки от рецензията.

1. Актуалност на дисертационния труд

Областта, от която са проблемите разглеждани в дисертацията може да се отнесе най-общо към повърхностно-активните вещества (ПАВ) и тяхното миещо действие, обект представляващ изключителен интерес преди всичко в приложно отношение, но, както ясно личи от представената работа – изпълнен с достатъчно научна проблематика. В дисертацията се изследват актуални проблеми, поставени от най-заинтересуваните среди, ако могат така да се нарекат фирмите и компаниите, занимаващи се с производство на миещи препарати на базата на ПАВ. Конкретно, става въпрос за изследване на механизмите и кинетиката на адсорбция на йоногенни ПАВ върху повърхности течност-въздух, течност-твърдо; влиянието на електролити; ефекти на ПАВ върху динамиката на трифазния контакт.

Накратко, отговаряйки на въпроса от тази точка, считам че темата на дисертационния труд е актуална, както в приложно, така и в научно отношение. Между другото, нейната актуалност се потвърждава и от факта, че значима част в дисертацията (5 от 6-те от статии, върху които е изградена) са по проекти с компанията Colgate Palmolive, както и от забелязаните досега общо 71 цитати.

2. Компетентност на докторанта

Отговорът по тази точка се базира главно върху съдържанието на дисертацията, от степена на отразяване на световните достижения в областта, от мястото на докторанта в научната продукция по дисертацията, фактическото му участие в научните форуми, както и от личните впечатления. Прочитът на дисертацията ме убеждава в задълбоченото познаване на докторанта върху материията, с която се е занимавал. Тази преценка беше значително улеснена от прегледния начин на построяване на изложението: всяка глава започва с анотация, последвана от увод, общи теоретични положения, т.н. специална част, т.е. резултати (теоретични и числени) получени от докторанта (включая тяхното обсъждане и анализ), заключителни бележки и изводи. Важен и много препоръчителен като стандарт за подобен род изложения е изборът литературата да бъде дадена в края на всяка глава. Към начина на изложение трябва да се отбележи богатото илюстриране на текста с фигури, графики и таблици, което също допринася за адекватното ориентиране в гледната точка на автора и основанията за крайните изводи. Нещо повече, в улеснение на читатела (и рецензента), публикациите по дадения проблем са цитирани в началото на съответния раздел.

Освен споменатото по-горе удачно групиране на литературата по глави, считам че като информационен елемент тя много добре отразява съвременното състояние на проблема. Прави впечатление, също така подбора на оригиналните работи на авторите свързани с непреходни приноси в областта.

По останалите критерии към компетентността на кандидата (научната продукция, участието в научни форуми и личните впечатления) ще имам възможност да взема отношение в следващите точки от рецензията, но преди това съм длъжен да спомена за две мнения, приложени към документите на г-н Колев. По същество това са отзиви за приносите на докторант Веселин Людмилов Колев (така са наречени тези мнения от самите автори: д-р инж. Стефан Димитров, ръководител направление "Мрежи и комуникации" към УИЦ и доц. д-р Аля Таджер, ръководител на Лабораторията по Квантова и изчислителна химия към катедра Физикохимия). И в двете мнения се отбелязва високата степен на квалификация и ползотворната дейност на докторанта, конкретно в популяризирането и прилагането на операционната система Linux. Тези високи оценки напълно хармонират и с подхода, приносите и резултатите в самата докторска работа.

Накратко, считам че компетентността на г-н Колев е на едно много добро, издържащо съвременните международни изисквания за степента ДОКТОР ниво.

3. Методика на изследването

Изследването е главно комбинация от теоретико-числени процедури – разработване на теоретични модели и проверка на тяхната адекватност върху експериментални данни. Подходът при проверката на адекватност на модела включава две стъпки: фитване (казано на жаргонен език) на теоретичната зависимост към експериментални данни и интерпретация на получените от този фит параметри на модела. Следва да се отбележи, че проблематиката е наложила използването на нелинеен фит, за който е разработен оригинален (собствен) софтуер.

В заключение, при тези изследвания кандидатът е приложил съвременните средства за обработка на експериментални данни, като е показал високата си компютърна грамотност, впрочем отбелязана и коментирана вече по-горе.

Настоящият труд ползва резултатите от експерименти (глави 4-6), които също може да се каже, че са провеждани на базата на съвременни експериментални методики, напр. апаратура за измерване на ζ - потенциал, но тъй като кандидатът няма претенции към експеримента, тук няма да се спирам върху тази страна от работата.

4. Аналитична преценка и достоверност на материала, върху който се гради дисертационния труд

Цялостното изложение на дисертацията, прегледът на графиките, таблиците и пр. първичен материал, коментарите и най-вече, самите публикации и докладите изнесени на тези форуми не оставят никакво съмнение за достоверността на получените експериментални данни и оригиналността на тяхната интерпретация. В това отношение ще прибавя и впечатленията от личните ми разговори с г-н Колев, от които съм напълно удовлетворен.

5. Основни приноси

Авторът е формулирал 6 приноса – по един към съответната глава от дисертацията и тъй като зад всеки от тези приноси стои по една публикация, те като цяло са аргументирани. Съгласно приетата от ВАК класификация бих отнесъл приносите към получаване и доказване на нови и потвърдителни факти, с елементи на доказване на нови страни на съществуващи проблеми. Тъй като приносите дават облика на постигнатото в най-концентриран вид, ще си позволя някои допълнителни констатации, коментари и въпроси по някои от тях.

В приноси 2 и 3 (отговарящи на съдържанието на глави II и III) има претенции, както към теорията, така и към (да ги наречем) изчислителните части. Предвид авторския състав на цитираните към тези глави статии, личният принос на кандидата е трудно да се конкретизира. Разбира се, резултатите в една работа са плод на целия авторски екип, но при индивидуални характеристики (каквато е целта на настоящата рецензия) е важно да се отбележи къде е главното участие на кандидата. След разговори с г-н Колев се установи, че главният принос е в разработката на числената процедура по обработката на експеримента и проверка на теоретичния модел.

В принос 4 се твърди, че е разработен метод за определяне адсорбцията на йонни ПАВ върху твърди частици. Ако съм се ориентирал правилно, тук основният експериментален материал е резултат от измерването на електрофоретичната подвижност, който се извършва по известен метод, с фабрична апаратура и тогава като нова методологична новост остава предложениия теоретичен модел (свързващ ζ -потенциала с адсорбцията). И тук бих отправил въпрос на докторанта, аналогичен на горния: какъв е неговия личен принос към теорията, а от там и към метода?

Приноси 5 и 6 се отклонят от чисто адсорбционната тематика и тематично могат да се отнесат към свойствата на трифазен контакт.

Тъй като в момента наша група се занимава с аналогични проблеми ще си разреша да бъда малко по-подробен по тези приноси.

На първо място няколко технически въпроса и бележки:

- На фиг.3 не е означена дълчината на дъгата s ; тя вероятно също е обезразмерена?
- Параметрите r_c и θ директно измерени ли са или са изчислени от системата (3), стр.171?

Относно интерпретацията на трите стадия в еволюцията на капката (фиг.4):

- Защо се пренебрегва адсорбцията на ПАВ върху повърхността SW?
- Важен параметър за динамиката на трифазния контакт е повърхностното напрежение OW; същевременно никъде в работата не са приведени данни за $\sigma_{ow}(t)$. От разговорите ми с кандидата стана ясно, че $\sigma_{ow}(t)$ се изчислява от профила; бих препоръчал в експозето или в отговорите да се даде отделно тази зависимост, $\sigma_{ow}(t)$.

Кинетиката в т.н. III стадий в известен смисъл напомня първия – по отношение на скоростите на изменение на контактния тъгъл и на радиуса на контакта – само че в

обратна посока. Тъй като съгласно предложението сценарий, σ_{ow} още в началото на втория етап е достигнал равновесната си стойност, в третия стадий няма основание то да се изменя по-нататък. Тогава, ако трябва да се придържаме към динамичното уравнение на Юнг (ур.5, гл. V), би следвало да се приемат като променливи останалите повърхностни напрежения. Но експерименталните данни и от този етап са интерпретирани чрез ур(9), което пък е резултат от допускането че въпросните повърхностни напрежения са константи. Ето това е последният ми въпрос към кандидата, по който би ме интересувало неговото мнение и отговор.

6. Участие на докторанта

По тази точка вече изказах някои впечатления, но за да бъда още по-конкретен ще прибавя, че местата на г-н Колев като съавтор в представените в дисертацията публикации са 2 първи, 2 втори и 2 трети, като обръщам внимание в колективи от 5-6 автори. С други думи, кандидатът е в членните места на съавторите във всичките трудове. Но не само тези формални показатели, а и всички останали елементи по докторантурата, самият текст на дисертацията доказват активното и ангажирано участие на кандидата в получаването на дискутираните резултати.

7. Публикации по дисертацията

Дисертационният труд е обнародван в 6 статии и е докладван на 5 научни форуми. Публикациите са вrenomирани международни списания в областта (*Langmuir, J. Colloid Interface Science* и *Industrial & Engineering Chemical Research*). От докладваните материали 3 устни (2 от които поканени доклади) и 2 постера – всичките на авторитетни международни форуми.

Важен наукометричен елемент на дисертацията са забелязаните цитати върху включените работи, общо 71 разпределени практически равномерно върху всичките шест от тях.

Към тази точка съм задължен да взема кратко отношение върху едно иначе непряко свързано със защитата, но все пак важно обстоятелство от творческата биография на кандидата: фактическото прекъсване на неговата продукция от 2005 насам. Отговорът на този въпрос, споменат в мнението на неговите ръководители и потвърден лично от самия кандидат се крие в сериозни лични проблеми, които за съжаление понякога възникват.

8. Приложение на резултати от дисертационния труд

Както беше вече упоменато, голяма част от изследванията са свързани и финансиирани от компанията Colgate Palmolive, т.е. следва да се очаква, че те поначало са приложно ориентирани. Какво е фактическото тяхно използване, обаче е един засега отворен въпрос, свързан със спецификата на фирмени договорни условия.

9. Препоръки

По отношение на проблематиката в дисертацията бих препоръчал да се проведат експерименти и върху други (добре дефинирани повърхности, например слюда) с цел изясняване на обстоятелствата около кинетиката на трифазната линия. Струва ми се, че включването в анализа и на нормалния баланс (архимедовата подемна сила и адхезията) също е необходимо.

10. Автореферат

Авторефератът отговаря на изискванията и правилно отразява основните положения и научните приноси на дисертационния труд. Информационната карта (формулярът "Сирена") е попълнена съгласно изискванията.

11. Други въпроси

Няма

12. Заключение

Въз основа на гореизложеното убедено препоръчвам на Уважаемия Специализиран Научен съвет по Теоретична химия при ВАК да присъди на г-н Веселин Людмилов Колев образователната и научна степен "ДОКТОР".

04 януари 2010 г.

София

С уважение: