

СТАНОВИЩЕ

върху дисертационен труд за придобиване на образователна и научна степен „доктор”

от д-р Веселин Д. Тончев, доцент в Институт по Физикохимия – БАН, член на научното жури със Заповед No. РД 38-647 / 30.10.2015 г.

Автор на дисертационния труд: Цветан Красимиров Захариев

Тема на дисертационния труд: „Извеждане на термодинамични параметри на нискомолекулни амфифилни вещества“

Представен е следният набор документи: автореферат (от 60 стр., 56 от тях номерирани), автобиография (на 4 стр. в европейски формат), дипломи от бакалавърската (с отличен успех) и магистърска (с пълно отличие) степени, дисертация (146 стр., 141 номерирани, 198 цитирани източника, увод, литературен обзор, глава 3 посветена на изчислителните методи, глави 4-6 с резултати, заключение и отделен раздел/глава 8 за приносите, фигурите, таблиците и уравненията следват независимо номериране в рамките на отделните глави), копия на 4-те статии (едната подготвена за печат, една в списание с много висок за химическата област импакт фактор и две други без значение за бъдещата кариера на дисертанта), списък с тези публикации, протокол от предзащитата, заповеди за зачисляване и продължение и удостоверение за взети изпити. Потърсих публикувани в Интернет изискванията за присъждане на степеня „доктор“, към които се придържа Химическия факултет на СУ, но не ги намерих. Попаднах на такива в съседен факултет (Физическия), спрямо тях докторантът има един недостиг – само една публикувана статия в списание с импакт фактор срещу две изисквани от Физическия факултет. Не познавам контекста на тези изисквания и приемам, следвайки здравия разум, че наборът от публикации, представен от Цветан Захариев е достатъчен за да му бъде присъдена ОНС в Химическия факултет на СУ. Разбира се, остава усещането, че в този силен екип, в който е работил, сигурно е могъл да постигне и повече, но в това съждение не се крие критика към докторанта и ръководителя му.

Следващото, което направих е да проверя дали работите в дисертацията имат някакви цитати, но не открих. Не го намирам за тревожен знак.

Запознах се с претенциите на докторанта, както са изложени в глава 8 Приноси и ги сравних със заключителните секции на двете статии под номера 2 (публикувана в *Journal of Computational Chemistry*) и 4 (подготвена за печат), с идеята да се ориентирам каква част от тези приноси е преминала през надлежно рецензиране и на каква то тепърва предстои. Може да се твърди с достатъчна степен на определеност, че единствено принос 1 отговаря на статия 2, докато останалите приноси следва да бъдат отнесени към по-късни периоди в работата на докторанта, основно те са групирани в статия 4. Един по-внимателен прочит вероятно ще ги намери за основателни, такова е и моето впечатление. Нека възпроизведа тук този първи принос (без новостите):

„Разработен е систематично и е валидиран модел на течни алканови масла, който възпроизвежда ключови структурни, термодинамични и транспортни характеристики на течностите в сравнително широк температурен интервал“.

Като отминем въпроса за това доколко е широк „широкият температурен интервал“ (в статия 2), тази претенция може изцяло да бъде призната и дори тя само стига за заключението най-долу. Авторите, обаче, не спират дотук и развиват подхода така, че той да работи и при моделиране на границата вода-масло (принос 2), а също и предлагат и детайлизиран подход към свободната енергия на алканоли при преноса им през тази фазова граница (приноси 3 и 6). За целите на настоящата защита тези претенции могат да бъдат приети напълно естествено.

В края на това становище няма да се въздържа и от две забележки (очаквам рецензентите да се спрат на граматиката на дисертацията!):

1. Цитат: „Направените дотук наблюдения позволяват да се заключи, че въз основа на симулационните данни са възпроизведени правилно порядъкът на дифузионния коефициент и тенденциите на изменение на тази величина при повишаване на температурата и удължаване на въгледородната верига. Въпреки че получените дифузионни коефициенти са два пъти по-ниски от действителните този проблем може да

бъде преодолян чрез по-дълги симулационни времена.“ (стр. 31 от автореферата/стр.92 от дисертацията).“ До колко може да бъде преодолян и с колко по-дълги времена? И изобщо що за резултат е този, който зависи от времето на симулация и то по неявен начин?!

2. Думата „описател“ се среща по веднъж в дисертацията и автореферата и то чак в приносите. Вероятно дисертантът е заменил с нея вносната „дескриптор“ и така на практика е създал нов термин. Това едва ли е оправдано.

Изложеното дотук накратко, и на базата на запознаването ми с подготвените документи – дисертация, автореферат и други, както и твърдото ми убеждение, че са резултат от работата на докторанта под ръководството на научния му ръководител и във взаимодействие с останалите членове на екипа (А. Таджер, Р. Славчов), ми дават достатъчно основания да препоръчам на почитаемото Научно жури да гласува в полза на присъждането на Цветан Захариев на ОНС „доктор“ и с убеждение ще гласувам „за“ едно такова решение.

София, 22.12.2015

/ доц. д-р Веселин Тончев/