

## СТАНОВИЩЕ

по дисертация на тема „Извеждане на термодинамични параметри на нискомолекулни амфибилни вещества”

на **Цветан Красимиров Захариев**

докторант в професионално направление 4.2 Химически науки, Теоретична химия

от доц. д-р **Анела Николова Иванова**

СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация, научен ръководител на докторанта

Представената за защита дисертация разглежда процеса на адсорбция и преминаване през фазовата граница вода-масло на нискомолекулни нейонни амфифили с методите на молекулното моделиране. Интересът към този проблем беше породен в рамките на сътрудничество с гл. ас. д-р Радомир Славчов. Целта беше интерпретиране на молекулно ниво на широко застъпените в практиката физикохимични процеси на междуфазово преминаване на амфифили и намиране на независим начин за оценка на някои параметри, които са важни за описанието на такива явления на течни фазови граници.

В рамките на работата по дисертацията беше разработен изчислителен протокол за описание на течна маслена фаза от нискомолекулни алкани (n-пентан до n-хептан), който възпроизвежда коректно експериментални структурни, термодинамични и транспортни свойства на течните масла в сравнително широк температурен интервал, както и основни характеристики на фазова граница вода-масло. Беше предложен нов графичен метод за бърза оценка на големината на топлинния капацитет  $C_p$ , което е нетривиална от изчислителна гледна точка задача. Основен резултат от изследването на докторанта е пресмятането и интерпретирането на профили на изменението на свободната енергия при преминаване на амфибилни нормални алканоли (от пентанол до хептанол) от водна в маслена фаза. Предложени бяха два подхода за оценка на изменението на химичния потенциал, което се пада на една функционална група, и беше направен анализ на приносите на отделните функционални групи на амфибилите към промяната на свободната енергия. Така изведените параметри могат да се включват като стойности във феноменологични модели или да послужат като основа за изграждане на количествена молекулна теория, която обяснява енергетиката на изследвания процес.

Всички пресмятания в дисертацията са проведени с методите на класическата молекулна динамика (МД) и са лично дело на докторанта. За успешно изпълнение на поставените изследователски задачи той усвои на професионално ниво съществена част от инструментариума на МД симулациите, направи обзорен преглед на теоретичните методи за пресмятане на свободна енергия от МД траектории и в голяма степен самостоятелно разработи изчислителен протокол, който приложи успешно за изследване

на моделните системи вода-алкан-алканол. Тази част от работата по дисертацията беше подпомогната от проведената от него краткосрочна специализация по проект на МОН „Наука и бизнес“ в Университета на Сан Франциско, САЩ в групата на проф. Андрю Похорил. По време на работата по дисертацията докторантът разви уменията си за разбиране и прилагане на сложни теоретични концепции и модели и за анализ и интерпретиране на големи масиви от числени данни. Той има способностите да разглежда самостоятелно научни проблеми. По време на докторантурата г-н Захариев с ентузиазъм се занимаваше и с преподавателска дейност, като води упражнения по „Физикохимия“ и подпомага подготовката на ученици за национални подборни и международни кръгове на олимпиадите по химия.

Резултатите от научните изследвания по дисертацията са публикувани в 2 научни статии, едната от които в международно списание. Докторантът има основния принос и в излязлата наскоро от печат обзорна работа върху методите използвани за пресмятанията в дисертацията. Получените по време на докторантурата новости са докладвани лично от него на 4 международни научни форума и на 1 национална студентска конференция.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените за защита материали покриват всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав на РБ, Правилника за неговото прилагане и препоръчителните изисквания за получаване на научни степени на Факултета по химия и фармация на СУ „Св. Кл. Охридски“. Въз основа на това и на всичко гореказано давам положителна оценка на дисертационния труд и препоръчвам на уважаемото научно жури да присъди на Цветан Красимиров Захариев образователната и научна степен „доктор“.

17. 12. 2015 г.

гр. София

/доц. д-р Анела Иванова/