

СТАНОВИЩЕ

от акад. проф. дфзн Петър Атанасов Кралчевски от ФХФ-СУ
председател на научното жури по защитата
на дисертационен труд за получаване на образователната и научна степен
“Доктор”

Автор на дисертационния труд: Иглика Максимова Димитрова, редовен докторант
по специалност 4.2 Химически науки (Физикохимия) към катедра «Физикохимия»
при ФХФ-СУ

Тема на дисертационния труд: “Кавитационен модел на квадруполни течности и
електрични свойства на повърхности с диполен момент”

Кратки биографични данни за кандидатката. Иглика Максимова Димитрова, родена през 1988 г. в гр. Плевен, завършва Математическата гимназия в родния си град през 2007 г. Бакалавърска степен получава в специалност „Химия” в Химическия факултет на СУ "Св. Климент Охридски" като първенец на випуск 2011 г. с успех от семестриалните изпити Отличен 5.97 и от държавните изпити – 6.00. Магистърска степен получава през 2013 г. в магистратура “Колоидни системи в съвременната наука и технологии” в Химическия факултет (ХФ) на СУ с успех Отличен 6.00. През февруари 2014 година е зачислена на редовна докторантура с научен ръководител доц. д-р Цанко Иванов и научен консултант гл. ас. д-р Радомир Славчов. През 2012 г. тя печели златен медал на Националната студентска Олимпиада по компютърна математика. През 2015 и 2016 г., като докторант тя бе ръководител на студентския отбор на ФХФ на тази олимпиада, който под нейно ръководство спечели общо 5 сребърни и 3 бронзови медала.

Научни публикации. Иглика Димитрова е съавтор на 8 научни публикации. От тях 5 са по темата на дисертацията ѝ. Две от тях са във високо авторитетното списание *J. Chem. Phys.* (2015 и 2016 г.), като вече са забелязани 2 цитата.

Докладване на резултатите пред научни форуми. Резултати от изследванията на дисертантката са включени в материали, представени на 9 научни форума, от които един доклад на международна конференция; 7 доклада и един постер на национални конференции и семинари у нас.

Преподавателски опит. По време на докторантурата Иглика Димитрова е водила 105 часа семинари по Физикохимия на специалностите Екохимия и Химия, II-ри курс

Тематика на дисертацията. Дисертацията представлява системно теоретично изследване на ефекта от собствените и индуцирани квадруполни моменти на молекулите върху свойствата на течностите и междуфазовите граници течност/течност и течност/газ.

Основни научни приноси. Съгласно чл. 66 от *Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“*, „дисертационният труд е научно съчинение, което съдържа научни или научноприложни резултати с оригинален принос в науката и показва, че кандидатът има задълбочени теоретични знания по съответната специалност и способности за самостоятелни научни изследвания“. В края на дисертацията (с. 96) са формулирани четири оригинални приноса, с научната значимост на които аз съм съгласен:

1. Предложена е самосъгласувана формулировка на квадруполната електростатика на линейни хомогенни изотропни среди (включително пълен набор гранични условия).
2. Изведен е тензорът на Максвел за квадруполаризуема среда.
3. Кавитационният модел на Онзагер е обобщен към квадруполни диелектрици. Използван е, за да се определи квадруполаризуемостта на 10 квадруполни течности от експериментални данни за диелектрична проникваемост.
4. Развита е теорията на междуфазовата граница между квадруполни диелектрици и дифузния диполен слой.

Коментари. Дисертацията е написана ясно и съдържателно, на отличен български език, като са приведени 377 уравнения и са цитирани 144 литературни източника. Демонстрирано е владение на високо ниво на апарата на електростатиката на кондензираната материя и неговото приложение за разработване на количествени теоретични модели.

В заключението към дисертацията (с. 94), авторката отбелязва: „Можем да изтъкнем три причини, поради които квадруполното уравнение на електростатиката се използва рядко в литературата: *първо*, има неяснота относно граничните условия; *второ*, не са известни стойностите на материалните характеристики на квадруполните среди – тяхната квадруполна дължина; и *трето*, не е известна формата на тензора на Максвел за квадруполна среда. В дисертацията са разгледани и, до голяма степен, разрешени и трите проблема.“

Съгласен съм с написаното от дисертантката, което дава друга формулировка на приносите в дисертацията. Обаче, има и *четвърта* причина, поради която не се отчитат ефектите от квадруполните моменти на молекулите в електростатиката на кондензираната материя, а именно, тези ефекти най-често са доста малки и оказват пренебрежимо влияние върху експериментално измерваните величини характеризиращи обемните свойства. Оценките на дисертантката, обаче, показват, че повърхностната поляризация може да даде много съществен принос към междуфазовото напрежение (вж. раздел 4.2.3). Една възможна посока за приложение на резултатите от дисертацията би могло да бъде количественото обяснение на стойностите на повърхностното напрежение на полярните течности (напр. вода, метанол, глицерол, и др.; вж. напр. Таблица 13.4 в книгата на J.N. Israelachvili, 3rd Edition), при които повърхностната поляризация би могла да даде съществен принос. За целта, обаче трябва да се привлече и статистическата теория на въпросните среди и да се оцени ентропийният принос на повърхностното подреждане на диполи. Подобни значителни ентропийни ефекти има и при стандартната адсорбционна енергия на повърхностно активните вещества и при хидрофобните повърхостни сили в колоидите.

Заключение

Дисертантката е извършила огромна по обем изследователска работа на високо теоретично ниво. Изведени са основни уравнения в теорията на квадруполните течности и техните гранични условия като резултатите са приложени за анализ на експериментални данни за диелектричната проницаемост на 10 различни течности. Резултатите имат фундаментален научен характер и тяхната значимост предстои да получи признание от научната общност. Всички изисквания на Правилника на СУ и допълнителните препоръки на ФХФ са удовлетворени. Ще гласувам убедено да бъде присъдена степената «доктор» на Иглика Максимова Димитрова.

Дата: 11 април 2017 г.

Председател на журито

Акад. проф. дфзн Петър А. Кралчевски