

Авторска справка

върху статии на доц. д-р Веселин Тончев, представени за конкурс във ФзФ на СУ, юни 2017 г.

Работите, с които участвам в конкурса за „доцент“ в катедрата по Метеорология на ФзФ на СУ са публикувани след 2003 г., когато защитих дисертация за придобиване на ОНС „доктор“. Когато през 2005 г. бях избран за „старши научен сътрудник II степен“/доцент/, в конкурса се участваше с публикуваните до момента статии и така припокриването между сега представените и използваните тогава е за сметка на статии 1.1 и 1.2.

Представям работите си, започвайки от тематиката, с която станах „доктор“ – теоретични и числени изследвания върху групирането на стъпала върху вицинални кристални повърхности. По нея работя и до днес, тя е номерирана с А1. Следващите тематика са подредени по реда на отдалечаване от основната тематика. Така първите три тематика съм номерирал А1, А2 и А3, защото са взаимосвързани и преплитат се, в ръководения от мен договор Т02-8/121214 има задачи и от трите. По А2 и А3 съм работил и преди 2003 г. Последната, по динамични свойства на слъзни филми, е обозначена с Б, за да бъде различена като скорозна и нова за мен, макар че по проблеми от теорията на релаксацията съм работил и през 90-те.

Преди да премина към конкретния анализ, следва да отбележа, че в сърцевината на изследователския ми, а и преподавателски, профил е численото изследване на сложни моделни системи и получаването на надеждни количествени резултати чрез внимателно обмислени и изчерпателни протоколи за наблюдение (мониторинг). Намирането на универсални, мащабно-инвариантни решения е най-близко до представата ми за това, какво е успешното по този път. Именно от тази лична перспектива и с този изследователски опит съм участвал и в разширени, нехомогенни като експертиза, изследователски колективи.

А1. Вицинални кристални повърхности, групиране на стъпала: 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 2.1, 2.2, 2.3, 3.1, 3.5, 3.6, 3.7, 4.1, 4.2, 4.3, цитирани общо 46 пъти.

Цитиранията са преброени според изискванията на ФзФ – само в списания от първа група, иначе имаме и доста цитати в чуждестранни дисертации и книги, което не ми изглежда непрестижно.

В рамките на тази тематика бях ръководител на бакалавърската теза на Красимир Янчев (Катедра “Физика на кондензираната материя”, ФзФ-СУ, 2005 г.), въведох в моделирането доц. д-р Богдан С. Рангелов, който успешно защити дисертация за ОНС „доктор“ през май 2009 г., а аз бях негов консултант. Бях и научен ръководител на докторантката Диана Станева, която беше отчислена с право на защита. Ръководил съм договор Ф1413/2004 с ФНИ, както и в момента – ЕБР с И-т по Физика на Полската АН. Изнасял съм многократно различни доклади и семинари.

Цялостното развитие на тематиката се забави осезаемо след 2005 г., достигайки минимум през 2013-2014 г., което рефлектира и върху броя на цитиранията ни, дори върху статии в списанията на Американското Физическо Дружество (PRB, PRL). Започнаха трудности в

публикуването за всички, областта беше напусната от големи имена, а чуждестранни партньори признаваха, че вече не могат да привличат финансиране по тематиката. Една глобална причина е, че скъпоструващите експерименти бяха фокусирани основно върху изпаряващите се вицинали на една само повърхност – тази на Si(111). И макар в 1.3 да са описани нови нестабилности – групиране на прави стъпала, групиране на стъпала с макрокинкове по тях и едновременно групиране и меандриране, всички по време на вицинален растеж, това стигна за едва 11 цитирания за 12 години. В същото време една цялостна теория на групирането в 1+1 измерения – 1.2, публикувана почти по същото време като 1.3, събира 29 цитирания, вероятно защото е продължение и кулминация в теоретичните усилия от предишните години. За други, по-детайлни разлики, ще стане дума нататък.

Една перспектива към областта и някои съществени приноси в нея се съдържат в мини-обзора 4.3., който написахме в края на 2016 г. с К. Сивьерска, докторантка в Тринити Колидж, Дъблин. Обзорът е фокусиран върху теоретичните и числени предсказания за минималното разстояние в групата стъпала l_{\min} като функция от размера N , при различни допускания за граничните режими на групиране – дифузионно-контролиран [i.6, цитирана 47 пъти] или кинетично-контролиран [1.2], както и за свойствата на стъпалата – прозрачни (адатомите не ги „усещат“ по време на дифузионните си разходки, разглеждания в работи на Стоянов, Марков, Рангелов) или непрозрачни (адатомите не могат да пресекат стъпалото, което е и единствен източник на адатоми за коя да е от терасите), като са представени и оригинални числени резултати за по-добра илюстрация на представения материал. В обзора се съдържа и критичен преглед на експерименталните изследвания в периода 1999-2011 г., насочени към проверка на предсказанията. Поведението на l_{\min} като функция на N е в основата на класификацията на явленията на групиране 3.6. Двата типа групиране, B1 и B2, освен по това поведение, постоянно или намаляващо респективно, се различават и по броя на характеристичните дължини, описващи повърхността и нейната времева еволюция. Така за описанието на B1 е необходима една дължина, докато за B2 са необходими две, по x и y , при предположение, че стъпалата остават прави, а не меандрират. Предсказания, основани на анализ на размерностите на обобщено u -ние в частни производни за времевата еволюция на кристалната повърхност, за това какво поведение следва да се очаква от различните класове на универсалност в термините на степенни зависимости (и в рамките на B2-типа), са направени в i.8, цитирана 35 пъти и неизползвана в дисертацията ми.

В методологическо отношение, един проблем, забавил развитието на моделните изследвания на групирането беше получаването в явен вид на скейлинговите предфактори (амплитуди) като комбинация от моделните параметри. Тази методологическа слабост е до голяма степен преодоляна в 2.2. и 3.7. Друг, директен подход към същия проблем (изследване параметър по параметър) е възприет в 2.1 и 2.3, но той работи само за размера на групите и не е приложим, когато в предфактора влизат и характеристичната дължина и характеристичното време, правейки го „нехомогенен“ – един параметър влиза по два начина и това прави числената идентификация на ролята му невъзможна.

Така или иначе, докато се решават по-фундаменталните проблеми, е важно различните изследвания да измерват едни и същи величини, които после да бъдат коректно

сравнявани. Така в статията 1.4 е описана числената реализация на протокол за изследване на явления на групиране, състоящ се от две (неоригинални, т.е. използвани поотделно и от други автори) схеми за наблюдение (мониторинг), сега работещи едновременно и „на кръст“ върху разстоянията между стъпалата –при едната (MSI) се следят в дискретни моменти от времето средни величини като среден размер на групите, средни ширини на групите и терасите, минимално за цялата система разстояние между две стъпала и прочие, като тази схема няма памет за минали моменти от времето. Другата схема (MSII) събира информация от всички такива дискретни моменти във времето, но по отделно за всеки размер на група, който се появява кога да е, т.е. има памет. Тя дава информация за средната ширина на групата за всеки размер поотделно, осредненото минимално разстояние и т.н. Съвпадението на данните от двете схеми за еднакви зависимости, например ширина на групата спрямо размер, е нетривиално и също незадължително, и е проявление на режима на „междинна асимптотика“ (по Г.И. Баренблат), когато системата е самоподобна по времето и в пространството, далеч от началните условия, но също далеч и от крайното състояние. Това дава възможност за съвместяване на данни, които могат да бъдат получени само по едната от двете схеми, както преди е правено в теоретичното изследване 1.2, където е приложена основно MSII за съчетаване на числени и аналитични резултати за зависимостта на минималното разстояние в групата от нейния размер (виж също 4.3), и в експерименталното изследване 1.3, където е използвана MSI за намиране на времеви зависимости, описващи групите. И обратното – несъвпадението на резултатите от двете схеми вече е знак за проблем и изисква тълкуване и избор. Числената реализация на този протокол, като съчетание на две неоригинални схеми за наблюдение смятам за свой основен методологически принос към тематиката. В тази статия (и в 3.1) съм извел и унията на „C⁺ - C⁻“ модела по идея на Алберто Пимпинели, изследвал съм линейната стабилност на модела в два варианта, написал съм кода, получил съм основните числени резултати. Тези статии, 3.1 и 1.4, са част от дисертацията на доц. Б. Рангелов.

Протоколът е използван за изследване на различни модели – 2.1, 2.2, 2.3, 3.5, 3.6, 4.1, 4.2, 4.3, като някои от изследванията вероятно щяха да бъдат публикувани и в по-престижни списания, ако областта беше останала активна в последните години.

Сега по същината на изследванията. В рамките на изследването, чиито резултати бяха синтезирани в 1.2 извърших обемни числени пресмятания. Кулминацията в тази статия е съвпадението между аналитични (от Стоян Стоянов и Йоахим Круг) и числени (BT) резултати. Допълнително и по моя идея беше показано, че скейлинговият параметър, разглеждан дотогава като проявление и описание на развитата нестабилност, се появява и в израза за линейната стабилност, описващ началните етапи на възникване на нестабилността, т.е. той по принцип може да бъде намерен и с анализ на размерностите. Пак там е предложена и детайлизирана гледна точка върху универсалността при явленията на групиране (BT, Круг и Пимпинели).

Приложението на MSII към конкретния експеримент е затруднено и така в 1.3 е приложена само MSI. Там са представени подбрани от Хироо Оми, Й. Хома и мен експериментални резултати, получени и по време на престоя ми в Япония, илюстриращи различните режими

на групиране, а заедно с Х. Оми и А. Пимпинели написахме статията. „Страничен резултат“ от дискусиите и сътрудничеството ни с тези японски учени е и 1.1, останала почти незабелязана. В частност, идеи за това изследване бяха генерирани по време на посещението на Х. Оми във Франция за кратък сабатикал по моя инициатива и по покана на А. Пимпинели.

В 1.4 и 3.1 е предложен нов модел на групиране, който според А. Пимпинели е представителен за цял клас модели, които в двумерния (2+1) случай биха довели до едновременно групиране и меандриране и характеризирани с разлика в референтните концентрации от двете страни на стъпалото. Количественото числено изследване на този модел генерира един нов клас на универсалност (поредица от експоненти), евентуално свързан и с появата на минималното разстояние в групата в нейното начало.

В 2.2 и 4.2 е предложен и изследван нов модел за групиране в рамките на В1 типа – за кинетично-контролирания (КК) случай, а в 3.5 у-нията за двата случая са „размесени на кръст“ (първия с втория член и втория с първия от съответните у-ния за скоростта на движение на стъпалата) с цел да бъде проследен ефектът и да се покаже, че двата модела – за КК и за дифузионно-контролирания случай (на Терсоф и съавтори, ФРЛ'1995) не са идентични, както би могло да се заключи само на основата на времевото поведение на размера на групите.

Изследването 4.1 е паралелно с изследване на Ч. Мисбах и сътр. (Чанг и съвт., ФРЛ'2006) като осигурява и количествена информация за времевото поведение на модела в два различни режима според стойността на силата на електромиграция. Числените резултати за него започнах да събирам по време на работата си с Ч. Мисбах в Гренобъл (2002 г.), а завърших в сътрудничество с Б. Рангелов.

В 2.1 и 2.3 е използван един нов за нас метод – този на Клетъчните Автомати и така е изграден пълноценен модел на атомен мащаб за растежа на вицинални кристални повърхности. Растежните събития се случват едновременно за цялата система, а дифузионните „размесвания“, едно или повече, са в сериен режим, т.е. частица след частица. Два алтернативни източника на нестабилност са изследвани – асиметрична дифузия и безкраен обратен Швьобелов бариер, който не може да бъде изследван с у-ния от типа на тези в модела на Бъртон, Кабрера и Франк. Получени са скейлингови зависимости за времевото поведение на ширината на терасата, размера на групата и размера на макростъпалата, като е идентифицирана, като комбинация от моделните параметри, времевата скала, която прескалира времето. Показано е в частност как параметъра n_{DS} , управляващ прехода от дифузионно-контролиран (ДК) към кинетично-контролиран (КК) процес, влиза в предфактора на времевия скейлинг на размера на групата N . Или, с други думи, как комбинацията от параметри на модела прескалира времето, измервано в растежни събития („ъпдейти“). Двата режима са неразличими от степента във времеви скейлинг на размера на групата, но различни от степента на размера на макростъпалата. При тези изследвания бях в основата на построяването на модела, писах всички начални версии на кода, получавах заедно с останалите числени резултати и писах съществени части от статиите.

A2. Изследвания върху растежа в системи с ограничена размерност (тънки филми), вкл. фрактален растеж: 1.8, 1.11, 1.12, 3.2, 3.3, 3.4, 3.8, цитирани общо 10 пъти.

В рамките на тази тематика съм ръководил договор с ФНИ БМ9 – за двустранно сътрудничество с Р Македония (БЮРМ). Консултант съм на отчислената с право на защита докторантка Десислава Горанова, която в момента завършва дисертацията си, като темата на дисертацията ѝ, макар и експериментална, беше формулирана на базата на числените резултати тогава и работата 1.12 съвместява експерименти и компютърно моделиране и е част от завършваната в момента дисертация на Д. Горанова. Бях научен ръководител, 2016 – 2017 г., на договор, финансиран от МОН през БАН за подкрепа на млади учени с ръководител гл. ас. Христина Попова.

Особено важна е 1.12, защото там за първи прилагаме новия за нас инструмент – Клетъчните Автомати, към проблеми от кристалния растеж. Всички частици се разполагат в симулационната кутия в началото и растежът се управлява от зададено предварително правило, като правилото може да управлява и растежа на различни по функционалността си частици. Между два растежни „ъпдейта“, случващи се едновременно за всички частици, се извършват едно или повече дифузионни „размесвания“, които по неизбежност са в последователен режим. В случая на 1.12, и в единия изследван модел, двата вида частици са различени според това как се отлагат – едната се отлага върху агрегата само върху частица от същия вид, но дори върху една, докато другата се отлага само върху две какви да е частици от агрегата, разположени на „кинк“ („половин кристал“) позиция. Преходът от дифузионно-контролиран (ДК) към кинетично-контролиран (КК) растеж е фокус на другия модел в 1.12, с един вид частица само, и се осъществява с увеличаване на броя n_{DS} на дифузионните „размесвания“ между два растежни „ъпдейта“. Така дифузията се забързва спрямо кинетиката. Количествено измерение за този преход е фракталната размерност на агрегатите. Тук моделът е изцяло мое дело, написах кода, получих заедно с Д. Горанова числените данни, написах съществени части от статията, вкл. и върху експериментите и я комуникирах.

Преходът ДК към КК растеж е част и от изследването 3.4, но пак там коректно е указано, че в рамките на класическия модел на Дифузионно-Контролираната Агрегация (ДКА) не е възможно тя да бъде и кинетично-контролирана, защото частиците се емитират една по една, което е възможно само при допускането за ДК. Кратък обзор върху ДКА е направен в 3.2, илюстриран с оригинални резултати, вкл. за прехода към линеен растеж. За този преход е показано в 3.8, че е генеричен за алгоритъма. Все пак, 3.4 борави и с две частици с „огледална“ функционалност – всяка се отлага върху себе си само, дори върху една частица от агрегата, и показва за първи път, че фракталният и спиралният растеж (виж и 3.3), два архетипа в кристалния растеж, могат да бъдат получени в рамките на един модел само при промяна на параметрите му. За тези две работи, 3.3. и 3.4, кодовете написа основно Б. Рангелов под мое непосредствено ръководство.

Изследването 1.8 е чисто експериментално, насочено към растежа на тънки филми от ZnO и аз участвам в обсъждането на резултатите от планирани отчасти заедно експерименти и писането на части от статията, а пък изследването 1.11 е само числено, насочено към

растежа на двумерни филми от частици, които се отблъскват помежду си, но са привлечени от интерфейса и там участвам съществено във всички етапи – от написването на кода, през получаването на числените резултати до написването на статията и комуникирането ѝ.

A3. Изследвания върху зародишообразуването, растежа и разтварянето на кристали: 1.5, 1.6, 1.9, цитирани общо 2 пъти

В 1.5 е намерено универсално решение за еволюцията на размера на кристалите, като процент от единствената характеристична дължина, зададена от пресищането и началния брой на зародишите, и паралелно за изчерпването на пресищането. Основно допускане на модела е за ДК растеж, което е материализирано в степента, с която пресищането участва в израза за нормалната скорост на растеж, която пък е пропорционална на скоростта на движение на стъпалата. Допускането за ДК е опосредствано със стойност на тази степен 1. Идеята за разглеждането и основанията на модела са на Христо Нанев, аз направих останалото, а после използвах две различни експериментални зависимости за получаване на оценки за експериментите върху растеж на инсулинови кристали и написах съответните части от статията. В 1.6 същият подход е приложен към разтварянето на кристалите, разликата е, че тук характерните дължини са вече две – появява си и началният размер на кристалите, а равновесната концентрация може да бъде достигната и преди пълното разтваряне на кристалите, тук извърших всички пресмятания и написах важните части от статията. Статиите 1.5 и 1.6 могат да послужат при изграждане на стратегии за алтернативна употреба на инсулин в кристална форма.

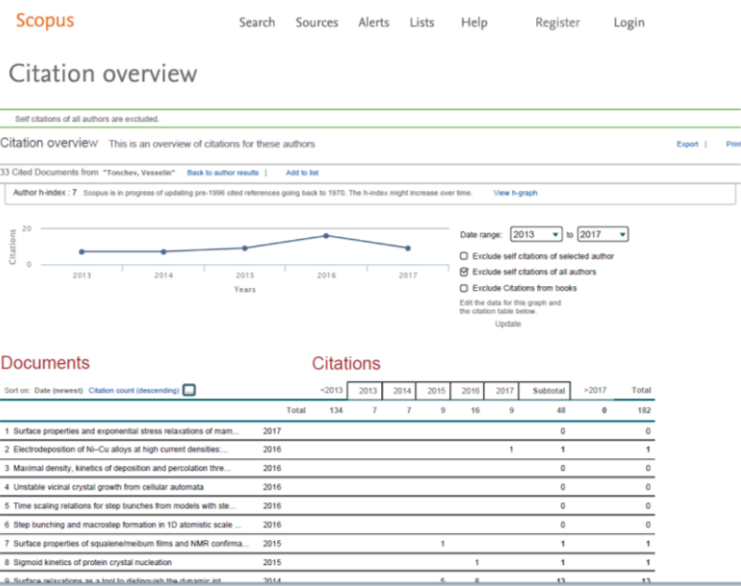
В 1.9 е намерена логистична функция, описваща пълноценно еволюцията на броя зародиши при различни пресищания. Анализът на поредица изследвания на чужди автори, който направих, позволи използването на тази функция за описание на данни от предишни изследвания и проявяване на универсалността в поведението (изключване ефекта на пресищането). Тази статия представлява важна перспектива към теорията на зародишообразуването.

Б. Изследвания върху динамиката на слъзни филми: 1.7 и 1.10, цитирани общо 17 пъти.


Заедно с Георги Ас. Георгиев, сега доцент във ФзФ, осмислихме методологически работи от 70-те години на 20-ти в., като на практика „възкресихме“ един метод за изследване на тънки течни филми. Написах първите версии на кода за обработка на данните върху релаксация на повърхностното (двумерно) налягане в такива филми и изградих една основа за изследване на релаксацията, основана на типични примери. Опитът от работата ми с Исак Аврамов през 90-те върху систематични модели на релаксация беше от полза. Бяха обработени данни от поредица експерименти с използване на т.нар. „везна на Лангмюир“ за изследване на липидната компонента на слъзните филми. Резултатите, получени по този метод различават слъзните филми от здрави хора и такива, болни от „сухо око“, според тяхната еластичност – докато „здравите филми“ остават еластични, „болните“ са дисипативни в определен диапазон от честоти и така се „чупят“ по-лесно. Това изследване и свързаното с него 1.10 залегнаха и в дисертацията на Славяна Иванова, защитена през 2016 г. в БФ на СУ. Специално 1.7 представлява предизвикателство към терапевтичната парадигма на „сухото

око“, посочвайки важноста на „надлъжните“ свойства на най-външния, липиден слой на слъзните филми, за разлика от сега лекуваните „напречни“ свойства на този слой и по-специално способността му за превенция на изпарението на водната сълза. За пръв и единствен засега път друг човек написа за изследване, в което участвам, че „measurements highlighting the different mechanical properties of healthy and diseased tear film could provide fresh understanding of the underlying causes of dry eye syndrome, and point to new treatments to ease the discomfort of millions of sufferers“ (Katie Bayliss, Chemistry World, 6 June 2014). Според дисертацията на С. Иванова и статия на Г. Ас. Георгиев от тази година с екип полски учени, има и търговска версия на кода.

Приложение 1. Информация от Скопус към 30.05.2017 за цитати и h-index на Веселин Тончев.



Приложение 2. Информация от Google Scholar към 30.05.2017 (не позволява премахване на автоцитиранията!) за Веселин Тончев.

		Google Наука	
		Всички	От 2012
 Vesselin Tonchev Associate Professor in Physical Chemistry, Inst. Physical Chemistry - Bulgarian Academy of Sciences Crystal growth, Computational materials science, TRIZ	Индекси на позоваванията		
	Позовавания	392	144
	h-индекс	9	7
	i10-индекс	8	6

Заглавие	1–40	Позовавания	Година
Properties and dynamic interaction of step density waves at a crystal surface during electromigration affected sublimation		96	1998
S Stoyanov, V Tonchev Physical Review B 58 (3), 1590			
Scaling and universality of self-organized patterns on unstable vicinal surfaces		66	2002
A Pimpinelli, V Tonchev, A Videcoq, M Vladimirova Physical review letters 88 (20), 206103			
Scaling properties of step bunches induced by sublimation and related mechanisms		65	2005
J Krug, V Tonchev, S Stoyanov, A Pimpinelli			

**Авторска справка за приносите в научните трудове на
доцент доктор Веселин Тончев
Институт по Физикохимия „Акад. Ростислав Каишев“ – БАН,
Юни 2017 г.**

- i. Публикации в реномирани международни списания с импакт-фактор
 - i.1 Извършил е изчисленията по модел, разработен в тази група
 - i.2 Участвал е в цялостното осмисляне на експериментите и написването на статията, както и в кореспонденцията ѝ.
 - i.7 Извършил е изчисленията по модел, разработен от Стоян Стоянов
 - i.8 Добавил е в разглежданията и генерализиращата степен от отблъскването между стъпалата и е подготвил съответните таблици.
 - i.9 Извършил е изчисленията по модел на Стоян Стоянов.
 - i.10 Участвал е в планирането и осмислянето на експериментите.
 - i.11 Извършил е изчисленията по модел, разработен от Стоян Стоянов.
 - i.12 Участвал е в обработката на експерименталните данни и написването на статията
 - i.13 Получил е уравненията на модела, изследвал е стабилността им и е извършил основните изчисления, написал е статията.
 - i.14 Разработил и параметризирил е модела по идея на Христо Нанев. Получил е решението и го е съпоставил с експериментални данни.
 - i.16 Участвал е заедно с Г. Георгиев в концептуалната разработка на изчислителния модел и е написал код върху него. Получил е решения.
 - i.17 Участвал е в планирането и осмислянето на експериментите.
 - i.19 Участвал е в планирането и осмислянето на експериментите.
 - i.21 Участвал е в планирането и осмислянето на експериментите. Измислил е модела и е получил различни данни върху него. Написал е основните версии на статията и я е комуникирал с редакцията.
 - i.22 Участвал е в планирането и осмислянето на експериментите.
- ii. Публикувани в пълен текст доклади на международни конференции и форуми в реномирани международни списания с импакт-фактор;

ii.1. ii.2. ii.3 Ръководил е цялостните изследвания, вкл. измислянето на модели, пресмятанятия по тях, написването на статиите.

iii. Публикации в реномирани национални списания:

iii. 4 Получил е уравненията на модела, изследвал е стабилността им и е извършил основните изчисления, написал е статията.

iii.7 Участвал е в създаването на моделите и в осмислянето на резултатите им.

iii.8 Получил е уравненията на моделите, изследвал е стабилността им и е извършил основните изчисления, написал е статията.

iii.11 Изследвал е модела, написал е статията и я е комуникирал.