

СТАНОВИЩЕ

от чл.-кор. проф. дмн Красимир Димитров Данов от ФХФ на СУ «Св. Кл. Охридски»
член на научното жури по защитата на дисертационен труд за получаване на
образователната и научна степен “доктор”

Автор на дисертационния труд: Гергана Станиславова Георгиева, редовен докторант по
специалност 4.2. *Химически науки (Теоретична химия – макрокинетика)* към катедра
«Инженерна химия и фармацевтично инженерство» при ФХФ-СУ

Тема на дисертационния труд: “*Синергизъм при растежа на гигантски мицели в
трикомпонентни разтвори на повърхностно-активни вещества*”

Кратки биографични данни за кандидата. Гергана Станиславова Георгиева е
родена на 30 ноември 1987 г. в град Враца. Бакалавърската степен на висшето си
образование завършва през 2010 г. (специалност „Компютърна химия“) и
магистърската степен през 2012 г. (магистратура „Колоидни системи в съвременната
наука и технологии“) в нашия факултет с отличен успех. През 2013 г. е зачислена в
редовна докторантура в катедрата по „Инженерна химия и фармацевтично
инженерство“ на ФХФ с научни ръководители акад. проф. дфзн Петър Кралчевски и чл.
кор. проф. дмн Красимир Данов.

Научни публикации. Гергана Георгиева е съавтор на 7 научни публикации: 6 в
международни научни списания с висок импакт фактор (Langmuir – 2, Journal of Colloid
and Interface Science – 3, Current Opinion in Colloid and Interface Science – 1); 1 в
българско списание. Три от тях са по дисертацията и като две са в списанието с висок
импакт фактор Langmuir.

Докладване на резултатите пред научни форуми. Резултати от изследванията
на дисертанта са включени в 15 презентации на конференции, от които 6 доклада и 9
постера. На престижни международни конференции са представени 9 материала.

Преподавателски опит. Гергана Георгиева има съществен принос към
преподавателската дейност на катедрата ни. Тя е водила семинари по курса
„Информационни технологии“ (4 семестъра по 45 ч.) и по курса „Информатика,
компютри и статистика“ (2 семестъра по 60 ч.) в бакалавърската степен на обучение.

Участие в проектната дейност на катедрата. Докторантката участва активно в
редица договори на катедрата както с международни фирми, така и с ФНИ. По
договорните тематики тя извършва нетривиални експериментални изследвания на
фазовото поведение на карбоксилати, стабилността на емулсии, обемната реология на

смеси от повърхностно-активни вещества (ПАВ), антибактериално действие на различни типове ПАВ върху специфични щамове бактерии и гъбички.

Тематика на дисертацията. Дисертацията включва системно експериментално изследване на реологичното поведение на смесени мицеларни разтвори от лаурилетерсулфат с една етилен-оксидна група (SLES) и цвистерйонното повърхностно-активно вещество кокамидо-пропилбетаин (CAPB) при добавяне на малки количества от октанова или додеканова киселини. Използваните концентрации на CAPB и SLES са сравнително ниски (до 400 mM) и мицеларните разтвори имат Нютоново поведение. При добавянето на киселините (в концентрации до 40 mM) вискозитетът на разтворите нараства и после намалява с увеличаване на концентрацията на киселините. Максималните стойности на вискозитета са няколко порядъка по-високи от тази на основния разтвор. Тематиката на дисертацията е разкриване на причините за това изменение, определяне характеристиките на съществено нелинейното реологично поведение както в квази-стационарен режим, така и в осцилаторен режим на деформации. Връзката между формата на гигантските мицели и структурата на мицеларните мрежи е изследвана с помощта на криогенна трансмисионна електронна микроскопия. Получените резултати имат практическо приложение за контрол на вискозитета на широко използвани формулировки на базата на CAPB и SLES.

Основни научни приноси. В края на представената дисертация са формулирани основните оригинални приноси, с научната значимост на които аз съм съгласен. Приносите в дисертационния труд аз класифицирам в три основни групи:

1) Експериментално е изследвана зависимостта на вискозитета при квази-стационарна деформация на прехлъзване за основните разтвори като функция на добавеното количество мастна киселина и пълната концентрация на CAPB и SLES. Показано е немонотонното поведение на вискозитета като максимумите се достигат при определени молни съотношения на компонентите в трикомпонентната система. Стойностите на максимумите (над 400 Pa·s за октанова киселина и над 100 Pa·s за додеканова киселина) намаляват с увеличаване на дължината на въглеродородната верига на мастната киселина и нарастват степенно с пълната концентрация на ПАВ. При мастни киселини с подобна хидрофобна опашка на основните ПАВ не се наблюдава съществена промяна на вискозитета. Тези резултати са обяснени със синергизъм на растежа на гигантските мицели, които при относителни ниски концентрации довеждат до не-Нютоново реологично поведение на разтворите.

2) Систематично е изследвано реологичното поведение на смесите при осцилаторни деформации на прехлъзване в диапазона на ъглови честоти до 20 s⁻¹. Полученият широк спектър от данни е обработен с моделът на Cates, който е обобщение на моделът на Максвел с отчитане на характерните времена на криволинейна дифузия и обратимо разкъсване на мицелите. Реологичният отклик на

системата се определя от отношението на тези времена и от еластичния модул. Еднозначно е показано, че изследваните системи притежават непренебрежима еластичност и нейната стойност е различна за концентрации на добавени мастни киселини преди и след достигане на максималните стойности на вискозитета. При нарастване на концентрациите на ПАВ еластичността нараства, докато характерното време за разкъсване на мицелите намалява за концентрации от 100 mM до 200 mM и после остава практически постоянно. И за двете мастни киселини се потвърждава правилото на Кокс-Мерц в рамките на експерименталната точност. Отклоненията от Максвеловото поведение са значими и по-силно изразени за случая на добавена октанова киселина. Реологичните измервания показват макро-ефекти, които не могат да се свържат пряко със структурата на мицеларните мрежи.

3) Проведените микроскопски наблюдения доказват изказаните хипотези на базата на реологичното поведение. И в двата случая (за октанова и додеканова киселини) нарастването на вискозитета на разтворите до достигане на максимума се дължи на растежа на гигантски сферо-цилиндрични мицели. Размерът им е впечатляващ – те достигат микронни размери в дължина при няколко нанометра в диаметър. След максимума поведението на мицеларните системи е различно. В случай на октанова киселина се преминава към много-свързани разклонени мицеларни структури, което довежда до намаляване на вискозитета. При достатъчно добавено количество додеканова киселина структурата на мицелите е различна – те преминават от цилиндрични към дисковидни и на това се дължи същественото спадане на измерените стойности за вискозитета. Интересно е да се отбележи, че съществуването на дисковидни мицели е доста рядко явление – обикновено те предшестват образуването на ламеларни фази, което не е наблюдавано в случая. Теоретично количествено обяснение на тези ефекти и зависимостта им от типа на ПАВ и концентрацията не ми е известно да е направено до момента. Наличните компютърни симулации на аналогични системи са ограничени по брой на молекули образувачи гигантските мицели и дават само качествено описание на възможните сценарии за структуриране на мицеларните мрежи. Затова неоспоримите експериментални данни и наблюдения ще помогнат за разработването на такива модели.

Оформяне на дисертационния труд. Дисертацията е написана ясно, системно и е безупречно оформена. Структурирането на материала е правилно подбрано като са разделени и добре подчертани сходствата и различията на изследваните мицеларни разтвори. Резултатите са подходящо представени и старателно илюстрирани от 37 фигури, 36 уравнения и 4 таблици. Цитираните 210 литературни източника свидетелстват за детайлно проучване на наличната литература по темата на дисертацията. Авторефератът правилно отразява основното съдържание на дисертационния труд и е оформен според изискванията.

Заклучение

Гергана Георгиева е получила оригинални и много интересни резултати. Реологичното поведение на смесените многокомпонентни гигантски мицели е изследвано прецизно и надеждно като образуваните обемни структури са доказани еднозначно с микроскопски наблюдения. Публикациите по дисертацията са в реномирани списания с висок импакт фатор. Всички изисквания на Правилника на СУ и допълнителните препоръки на ФХФ са удовлетворени. Ще гласувам убедено да бъде присъдена степента «доктор» на Гергана Станиславова Георгиева.

Дата: 11 юни 2018 г.

Член на журито

Чл. кор. проф. дмн Красимир Д. Данов