

## СТАНОВИЩЕ

за дисертация на тема „Компютърно изследване на наночастици: ефекти на метални йони, разтворител и лимонена киселина”

на докторант по Теоретична химия **Мирослава Александрова Недялкова**,  
направление 4.2 *Химически науки*

от доц. д-р **Анела Николова Иванова**, СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет по  
Химия и фармация, председател на научното жури

Основен обект на изследване в дисертацията са електростатичните взаимодействия на различни моделни заредени наночастици с противойони. Разкриването на свойствата на наночастиците на молекулно ниво е перспективна област от материалознанието, тъй като е свързано с успешното им приложение в редица съвременни нанотехнологии или като биоактивни агенти.

Дисертационната работа съдържа увод, сбито представяне на използваните физикохимични концепции и теоретични методи, обобщени резултати, литературни източници и приложение, представляващо техническа документация, илюстрираща проведените изчисления. В теоретичната част са представени основните положения на ДЛВО теорията, описваща формирането на двоен електричен слой на заредени повърхности, на метода на Молекулната динамика, с който са направени голяма част от пресмятанията и на Теорията на функционала на плътността, използвана във втората част от дисертацията. Изложението включва най-важните теоретични постановки и изчислителни алгоритми, свързани с представените в специалната част резултати и показва, че докторантката е овладяла теориите и методиките, необходими за генериране, осмисляне и анализ на числените данни, получени от нея. Работата би спечелила обаче, ако беше направено и едно кратко обобщение на направеното до момента, вкл. и от други изследователи, конкретно за изследваните системи или подобни на тях. Това би спомогнало за открояване на новостите в текущата работа.

Изследванията в специалната част са разделени в три секции. В първата е проследено разпределението във воден разтвор на  $\text{Na}^+$  и  $\text{Ca}^{2+}$  около и в моделна хидрофобна наночастица с отрицателно заредена повърхност. Във втората се разглежда влиянието върху структурата и енергията на свързване на позицията на адсорбция на  $\text{Na}^+$  и  $\text{Ca}^{2+}$  върху клъстери от 29 или 30 Au атома. Определени са и стабилни геометрии на Au клъстери с размер от 29 до 72 атома. Третата част представлява оценка на ефекта на молекулната конформация върху относителната стабилност на лимонена киселина в неутралната ѝ форма, както и във всички възможни депротонирани състояния. И за трите типа симулации са използвани подходящи теоретични методи и изчислителни протоколи, които позволяват адекватно определяне на търсените характеристики. Представената научна разработка допринася за разбирането на факторите, които са важни за коректно описание на двойния електричен слой при наночастици в частност и на адсорбцията на моноатомни катиони в по-общ план. Най-значимите приноси на дисертацията могат да бъдат обобщени по следния начин: (i) показана е възможност за

проникване на противойони под повърхността на наночастицата при дискретизация на заряда и е отчетено наличието на йон-специфичен ефект на презареждане (overcharging); (ii) установено е, че предпочетена позиция за адсорбция на  $\text{Na}^+$  върху Au клъстер е над атом, а за  $\text{Ca}^{2+}$  – над кухня; (iii) дадено е детайлно описание на конформери на лимонената киселина в зависимост от степента на депротониране.

Дисертацията съдържа основните компоненти на научно изследване. Целите са поставени ясно. Анализът на числените данни обхваща най-важните параметри, позволяващи да се определят търсените зависимости. Авторефератът отразява правилно съдържанието на дисертационния труд и представлява добро обобщение на поставените цели и получените резултати. Към дисертацията обаче могат да бъдат направени и някои критични бележки. Техническото оформление не е на най-високо ниво – има немалко правописни/технически грешки, описанието на данните във фигурите или обръщението към тях в много случаи е неточно, литературата не е оформена хомогенно, има повтарящи се цитати и липсващи автори, прави впечатление известна фрагментарност в изложението. Определено липсва сравнение на получените резултати със съществуващи работи по сходни проблеми/модели. Интересно е да се потърси обяснение на наблюдаваната концентрационна зависимост на разположението на противойони близо до външната повърхност на наночастицата. С това не искам да омаловажавам сериозния труд на докторантката при подготвянето, провеждането и анализа на масивните изчисления, които са били необходими за научното изследване.

Резултатите от научната работа са популяризирани по подходящ начин и в достатъчна степен, като са представени на 2 национални и 6 международни научни форума (3 устни доклада и 5 постера) и са публикувани в 2 реферирани (2 работи) и 1 неререферирани (3 публикации) международни списания. Доказателство за качествата на докторантката е и активното участие в координирането на два национални проекта в рамките на една от Оперативните програми на ЕС. Трябва да се отбележи и сериозната ѝ преподавателска натовареност през последните години, която тя успешно съчета с работата по дисертацията си.

Извършената работа е внушителна по обем и разнообразна по характер, което дава основание да се предположи, че докторантката е натрупала достатъчно опит и способности за провеждане на самостоятелна научна работа в областта на теоретичните физикохимични изследвания на наночастици. Представените за защита документи са според изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за неговото прилагане и Препоръчителните изисквания за получаване на научни степени на ФХФ при СУ „Св. Кл. Охридски“.

Всичко казано по-горе ме мотивира да дам положителна оценка на дисертационния труд и да подкрепя присъждането на образователната и научна степен „доктор“ на г-ца Мирослава Александрова Недялкова.

10. 03. 2014 г.

Председател на научното жури:

/А. Иванова/