

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Любомир Николов Николов, Институт по физикохимия, БАН,
член на Научно жури за защита на дисертационен труд
за получаване на образователната и научна степен „доктор”
в професионално направление 4.2 „Химически науки” (Физикохимия)

Автор: Иглика Максимова Димитрова
Катедра: Физикохимия, Факултет по химия и фармация,
Софийски университет „Св. Кл. Охридски”
Тема: “Кавитационен модел на квадруполни течности и електрични свойства на повърхности с диполен момент”

Основната цел на дисертацията е да се направи опит за обобщение на електростатиката на непрекъснатите среди с отчитане на квадруполите в средата. Целта е да се покаже, че в редица случаи на неполярни и слабо полярни среди (среди с малък диполен момент), взаимодействието на заряди (диполи и квадруполи) с квадруполи е определящо по порядък и не може и не трябва да бъде пренебрегвано. За изпълнението на тази цел са поставени няколко основни задачи, а именно: да се формулира обща постановка на макроскопската електростатика на квадруполни среди; да се формулира уравнение на състоянието за макроскопската квадруполаризация в течност и да се демонстрират резултатите от тази теория в някои важни за физикохимията теоретични и практически случаи/проблеми.

Кавитационният модел на квадруполни течности е подробно анализиран в трета глава, а четвърта глава е отделена на свойствата на междуфазовата граница между квадруполни течности. Пета глава е отделена за приносите и наукометричните данни на докторанта, в шеста са приложенията и в седма – цитираната литература.

Бих искал да задам следните няколко **въпроса**.

1. В раздел 2.3. *Гранични условия върху плоска повърхност*, в казаното след у-е (80) : „...Но в горното уравнение D_z^S би могло да е функция на z ...“ би следвало да коментирате евентуалната зависимост от z . Това е важно, защото от допускането за z -зависимост на z -компонентата на вектора на електричната индукция \mathbf{D} на повърхността S , последния член в у-е (80) (този с производната на делта функцията - δ_1) се преобразува доста удобно в изрази (81) за z -производната на z -компонентата на D^S (члена в скобите) и за стойността на z -компонентата на D^S , обаче, при $z=0$, т.е. върху S . Има ли физически основания за допускането, че z -компонента на D^S зависи от z ?

2. В у-е (82) набла операторът, действащ върху вектора D^S (т.е. дивергенцията от вектора на електричната индукция на повърхността S) изведнъж става двумерен - $\nabla^S \cdot D^S$ след като в източника – у-е (80), съответния член е с пълната (и по z -компонента) дивергенция, т.е. $\nabla \cdot D^S$. В светлината на предния въпрос: Защо векторът D^S има z -компонента, а набла операторът няма, т.е. диференциране по z отсъства? Изясняването на това недоразумение, според мен, ще изясни и вида на един от основните приноси в дисертацията – граничното условие - у-е (84), в което стои именно члена с повърхностната дивергенция - $\nabla^S \cdot D^S$.

3. Тук трябва да си призная, че въпросът ми бе провокиран от факта, че след извода на основно в научните приноси гранично условие - у-е (86) е цитиран сборник от задачи, и то във всичките статии по дисертацията. При това е казано, дословно (на стр. 26 от дисертацията): „Това условие (у-е (86)) е изведено за първи път от Батъйгин и Топтъйгин [36] ...“. Проверката ми в този сборник (стр. 283, в решението на задача 7.10) показва, че твърдението на цитираните автори всъщност е: „...следует, что квадрупольная поляризация эквивалентна дополнительной дипольной поляризации...“, и от вида на формулата за вектора на повърхностната поляризация \mathbf{P} се вижда, че : $P'_k = -\frac{1}{2} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_i}$, т.е. поляризацията се определя от **дивергенцията** на тензора на квадруполаризация \mathbf{Q} . А във вашето гранично условие у-е (86) става дума **само** за скока, т.е. за разликата на z -компонентите на \mathbf{Q} от двете страни на повърхността. Според мен, не би трябвало да цитирате руските автори за въпросното гранично условие. Дори нещо повече, защо ако авторството в извеждането му е ваше, не си го кажете в прав текст?

4. Следващият ми въпрос е по-скоро уточнение. На стр. 43 долу пише: „...в случая решаваме квадруполния аналог на уравнението на Поасон (ур. (67)) в сферични координати...“; на стр. 45 в задача а): „...Решаваме ур. (67) с плътност на заряда ...“; на стр. 47 в задача б): „...Решаваме ур. (67) в сферични координати за областите...“; на стр. 48 в задача в) : „...Решаваме същите уравнения (67),...“; същото е и на стр. 49 в задача г) : „...Като решим ур. (67) и наложим ...“. Може би, би трябвало да се уточни, че в същност не решавате u -е (67), а u -я (116) – т.е. тези само за радиалната компонента на потенциала? Това е от съществено значение (без да омаловажавам теоретичните ви приноси), тъй като едно е да се решава система от частни диференциални u -я от 4-ти ред за трите компоненти на ϕ , а съвсем друго е да се решава обикновено диференциално u -е, вярно от 4-ти ред, но само за радиалната компонента на потенциала (поради сферичната симетрия на задачите в анализа ви).

Основните ми **забележки** се отнасят до стила на изразяване в дисертацията.

Например, получаването на важно за анализа u -е (98) е доста неясен. Намесват се поне 5 уравнения, които в текста са описани последователно в реда – (96), (32), (97), (98), като в извода на последното (98) се твърди, че: „...където отново сме приложили теоремата на Гаус-Остроградски и сме използвали уравнението на състоянието за квадруполаризацията (ур. (63))...“. Или пък липсата на яснота в твърдението на стр 42: „Онзагер отчита въздействието на централната молекула върху заобикалящата я среда, като решава електростатичната задача и намира локалната поляризация на средата (която е различна от средната) и полето, което действа на централната молекула, отчитащо този корелационен, по същество, ефект.“ Срещат се и такива твърдения (стр. 49): „Тоест, може да допуснем, че нашето решение успешно обобщава задачата на Бъкингам към квадруполни среди.“ Едно решение или успешно обобщава досегашната задача или не? Доста, според мен, свободно се използват термини като *поле*, *градиент на полето*, които в същност би трябвало да бъдат потенциал ϕ или интензитет на електричното поле E и съответно градиент на потенциала ϕ , или градиент (голям) на вектора на интензитета на електричното поле E . В много изречения тази неточност води до отклоняване от логиката на изложението и пречи на читателя. Едновременната употреба на термините *електрично отместване* и *електрична индукция* за един и същи вектор D също води до объркване, да не говорим, че се срещат и *диелектрично отместване* и др. Освен това се прекалява с употребата на *класически*, особено в трета и четвърта глави.

Дисертационният труд се основава на три научни статии. Едната е в *Българско списание за химия* от 2014г., другите две са в престижното, с висок импакт фактор (2.894 за 2015г.) *J. Chem. Phys.* от 2015 и 2016г. Има и четвърта статия, предадена за печат в *Colloid J.* В първите две г-жа Димитрова е втори автор, а в третата - първи. Не познавам лично г-жа Димитрова, но от предоставените ми материали по защитата мога обосновано да твърдя, че приносите в дисертационния труд са в значителна степен нейно лично дело. Резултатите са представени на 9 международни и български научни форуми във впечатляващо съотношение: 8 доклада и само 1 постер. Тези данни, както и биографичните данни на кандидата го представят като високообразован и много перспективен изследовател.

Научните приноси в дисертационния труд определям като доказване с нови средства на съществени нови страни в съществуващи научни проблеми.

Въпреки многобройните си въпроси и забележки, които показват единствено и само интереса ми към теоретичния анализ и резултатите в дисертацията, убедено считам че: представения ми труд е напълно дисертабелен като съдържание и качество; удовлетворява изисквания на ЗРАСРБ и на Препоръчителните критерии при придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ за професионално направление 4.2. „Химически науки“. Препоръчвам на Почитаемото Научното жури да присъди на редовен докторант Иглика Максимова Димитрова образователната и научна степен “доктор” в професионално направление 4.2. „Химически науки” (Физикохимия).

24 април 2017 г.