

Рецензия

на дисертационния труд на проф. д-р **Румен Цеков**
“Класическо и квантово Брауново движение”
за получаване на научната степен **доктор на науките**
област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика
професионално направление 4.2. Химически науки

от проф. дн Венелин Енчев
Институт по обща и неорганична химия - БАН

Представеният от проф. д-р Румен Цеков комплект материали на хартиен носител включва следните документи: дисертационен труд, декларация за авторство и справка за съответствие с минималните национални изисквания за научната степен *доктор на науките* (представени са само броя на точките). На електронен носител са представени: автобиография, диплома за висше образование, диплома за образователната и научна степен „доктор”, дисертационен труд (на английски език), автореферат на дисертацията (на български и английски език); 35 научни публикации, които са включени в дисертацията и справка за съответствие с минималните национални изисквания за научната степен *доктор на науките*. Не е приложен доказателствен материал за участия в научни конференции, въпреки че има изброени такива в автореферата. Липсва и протокол от разширения катедрен съвет на Катедрата по физикохимия към ФХФ на Софийския университет, свързан с предварителното обсъждане на дисертационния труд и откриване на процедурата по защита.

Биографични данни

Румен Цеков започва да следва химия в Химическия факултет на Софийския университет през 1983 г. и се дипломира през 1988 г. с пълно отличие като магистър със специалност „Химична физика и теоретична химия“. Веднага след завършването си той започва научната си кариера в същия факултет, следвайки научната йерархия – асистент (1988), старши асистент (1991), главен асистент (1996) и защитавайки дисертация по физикохимия на тема „Флукуационни явления върху флуидни повърхности“ през 1993 г., под ръководството на проф. Борян Радоев. През периода от 1993 до 2002 г. той специализира в Университета в Бъфало (САЩ), гост-професор е в университетите в Синсинати (САЩ) и Цукуба (Япония) и е Хумболтов стипендиант в Техническият университет във Фрайберг (Германия). Напуска Софийския университет през 2002 г. и работи в Германия като Меркатор професор и гост-изследовател,

съответно в Университета в Карлсруе (2002-2006) и в Техническият университет в Аахен (2007-2009), както и за кратко (3 месеца) в Университета в Бризбейн (Австралия). Завръща се отново в Алма матер през 2009 г. като доцент в Катедрата, където е започнал научната си кариера, а две години по-късно е избран за професор по физикохимия.

Преценка на публикациите по дисертационния труд

Дисертацията е написана на 35 страници. Уводът е представен на пет от тях, основната част на дисертацията – на 28 страници, а останалите две съдържат приноси. Списък на авторските статии, включени в дисертацията е даден на още 3 страници, а самите статии следват след основния текст. Ако се вземат предвид приложените статии, тогава общият брой страници става 347.

Дисертационният труд се основава на 35 научни публикации, от които 19 са самостоятелни (№№ 7,8, 10, 13-17, 19, 21, 23-25, 28, 30-35), а от останалите 16, проф. Цеков е първи автор в 11 (№№ 1-6, 9, 12, 22, 27, 29, 32) и втори автор в 5 (№№ 4, 11, 18, 20, 26). Единадесет от тези 16 статии са само с двама автори. В 6 от всички 16 публикации с двама и повече автори, проф. Цеков е кореспондиращ автор. Всички публикации са в международни научни списания с импакт фактор. Подредени по квартали са както следва:

Q1: 12 публикации. Пет от тях в *Journal of Chemical Physics* (IF 3.220), по две в *Journal of Physical Chemistry B* (IF 3.266) и *Journal of Physics A* (IF 1.186), и по една в *Chemical Physics Letters* (IF 2.330), *Surface Science* (IF 1.839) и *Advances in Colloid and Interface Science* (IF 4.481).

Q2: 8 публикации. Две от тях в *Доклади на БАН* (IF 0.343) и по една в *Journal of Chemical Society Faraday Transactions* (IF 1.757), *Physica Scripta* (IF 1.164), *Foundations of Physics* (IF 1.147), *Europhysics Letters* (IF 1.978), *Physics Letters A* (IF 2.236) и *Annalen der Physik (Berlin)* (IF 1.401).

Q3: 14 публикации. Шест от тях в *Fluctuation and Noise Letters* (IF 1.208), четири в *International Journal of Theoretical Physics* (IF 0.659), три в *Chinese Physics Letters* (IF 0.943) и една в *Reports in Advances of Physical Sciences*.

Q4: Една публикация в *International Journal of Molecular Science* (IF 0.333).

Според информационната база данни SCOPUS, по статиите, включени в дисертацията, има забелязани общо 183 цитата в специализираната литература.

Представената информация за публикациите по дисертационния труд със съответните им квартали, както и броят на забелязаните цитати по тези статии, показва, че минималните национални изисквания за научната степен *доктор на науките* са надхвърлени съответно 5 и 4 пъти.

Приноси на дисертационния труд

Дисертацията се състои от три части. В първата част, вниманието е насочено към Брауново движение на класически частици. В рамките на класическата механика е изведено обобщено уравнение на Ланжвен за произволна механична подсистема, взаимодействаща си с хармоничната баня на едно твърдо тяло.

Уравнението на Ланжвен е приложено за описание на няколко различни случая на резонантно Брауново движение на атоми и на твърди, въртящи се и вибриращи димери върху твърди подложки, както и на нормални алкани в зеолити. В тези случаи се наблюдава немонотонна зависимост на класическия дифузионен коефициент от структурата на дифундиращата частица, а изчисленията корелират добре с експеримента. Изчислените дифузионни коефициенти на атоми и на димери от елемента рений на повърхността на волфрамови кристали съвпадат с опитно определените стойности. Тези изследвания, извършени заедно с проф. Ели Рукенщайн, са включени в 6 публикации (№№ 2-6), цитирани общо 59 пъти, сред които е и най-цитираната публикация (№ 2) в дисертационния труд. Получените числени резултати от дифузионните коефициенти са в отлично съответствие и с опитните резултати за дифузията на нормални алкани в зеолити. Изследванията, публикувани в две статии (№№ 9 и 11), заедно с колеги от университета в Синсинати също са сред най-цитираните – общо 39 цитата.

В биологията преносът на молекули през високо структурирани биологични мембрани също е пример за резонантна дифузия. В дисертацията, чрез обобщеното уравнение на Ланжвен, теоретично е изследвана движещата сила на миграцията на клетки, като е предложен модел за тяхното Брауново движение, и по аналогия на температурата, която определя Брауновото движение на неживи обекти е въведен важен биофизичен параметър, наречен темперамент на живите клетки, описващ стремежа за движение на живи биологични обекти. Получени са уравнения на Клайн-Крамерс и Смолуховски, където термичната енергия е заменена от темперамента. По този начин равновесното разпределение на Максвел-Болцман също описва и плътността на вероятността за скоростта и положението на живите клетки.

Във втората част на дисертацията е представена идеята, че електроните са частици, които могат да извършват и Брауново движение. Предложена е нова интерпретация на квантовата механика, при което, подобно на класическата механика, частиците са точкови по всяко време. Показано е, че квантовата механика се предизвиква само от виртуални квазичастици, които пренасят фундаменталните взаимодействия. Тези виртуални частици са вълни в координатното подпространство и квазичастици в импулсното подпространство. Те са и причината за

вълновия характер на квантовата механика, а не точковите частици, които тя описва. Фундаменталното уравнение на Шрьодингер е обяснено като резултат от удари между точковите и виртуалните частици.

Като аналог на уравнението на Ланжвен е изведено стохастично уравнение на Лоренц, описващо Брауновото движение на точковите частици в квантовата механика. Показано е как посредством калибровъчна трансформация, уравнението на Шрьодингер се получава от уравнението на Лоренц-Ланжвен.

В третата част на дисертацията е предложено стохастично уравнение на Бом-Ланжвен, получено при комбиниране на идеите на Бом и на Ланжвен. То описва Брауновата динамика в рамките на механиката на Бом. След това е изведено съответното уравнение на Смолуховски-Бом, което описва еволюцията на плътността на вероятността в конфигурационното подпространство на една квантова подсистема, взаимодействаща си с класическа околна среда. Това уравнение отразява стохастичната динамика на Бом-Ланжвен, описваща се с функционал на плътността. За числени пресмятания в химията е предложено нелинейно дисипативно уравнение на Кон-Шам, което подобрява кинетичния функционал на Томас-Ферми-Вайцзекер. В тази част на дисертацията е изведено нелинейно управляващо уравнение, което отразява правилно ентропията на отворените квантови системи и за разлика от линейните алтернативи, неговото равновесно решение е точната каноничната матрица на плътността на Гибс.

Прави впечатление, че статиите, в които са описани изследванията във втората и третата част на дисертацията (№ 1,7,10, 13-19, 21, 25-29, 31-35) са предимно самостоятелни, те са около 80% от общия брой. Водещата роля на дисертанта и в останалите публикации също е несъмнена. Броят на намерените цитати на статиите, на които се базират тези две части на дисертацията е по-малък от половината на общия брой цитати. Това е обяснимо, като се има предвид много специфичната област, в която е дисертацията на проф. Цеков. Не трябва да се игнорира и факта, че немалка част от статиите са публикувани през последните пет години.

Автореферат

Авторефератът на дисертацията представлява превод от английски на български език на нейното съдържание и приноси. Само там е представен много кратък списък на участия в научни проекти и конференции. Дори не са дадени заглавията на представените доклади или постери. Има няколко печатни грешки, които трябва да бъдат отстранени в крайния вариант на автореферата.

Забележки

Макар и написана по начин, нестандартен за нашите географски ширини, дисертацията като цяло прави добро впечатление на читателя. Имам една забележка, свързана с нейното техническото оформление. Като библиография са посочени само авторските статии. Този начин на представяне е много добър при оформяне на автореферат, но в дисертационния труд, по мое мнение, би било добре да се цитират и други литературни източници.

Заклучение

В заключение считам, че дисертационният труд обобщава значими научни резултати с водещ принос на автора. В преобладаващата част от статиите той е единствен автор. Проф. Румен Цеков е ерудиран учен с много интересни идеи в областта на химичната физика и теоретичната физика. Тези собствени идеи и виждания сигурно ще доведат до нови интересни резултати.

Убеден съм във високото ниво на неговата изследователска работа. Проф. Цеков е оставил видима следа с научната продукция, представена в дисертацията. Това ми дава пълно основание да препоръчам на почитаемото Жури да присъди на проф. д-р Румен Цеков научната степен “доктор на науките”.

27.08.2021 г.

проф. дн Венелин Енчев