

РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационен труд на тема:

„Класическо и квантово Брауново движение“

за получаване на научна степен „доктор на науките“

в професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия)

представен от проф. д-р Румен Цветанов Цеков

Рецензент: чл.-кор. проф. д-рн Красимир Димитров Данов – Катедра „Инженерна химия и фармацевтично инженерство“ при Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Кл. Охридски“

Кратки биографични данни

Румен Цветанов Цеков завършва през 1988 г. с пълно отличие Химическия факултет на СУ „Св. Кл. Охридски“ като магистър по химия, специалност „Химична физика и теоретична химия“. От 1988 до 2002 г. е асистент, старши и главен асистент във факултета, 2009 г. е избран за доцент и през 2011 г. за професор по физикохимия в съответната катедра на Факултета по химия и фармация на Софийския университет, където работи и в момента. През 1993 г. защитава докторска дисертация на тема „Флуктуационни явления върху флуидни повърхности“ и му е присвоена научната степен „доктор“ по направление 4.2. Химични науки (Физикохимия). За активната му научна дейност свидетелстват 150 публикации и многократните участия в международни и национални научни конференции и симпозиуми, дългосрочните му научни специализации и стипендии в Университета в Бъфало (САЩ), Хумболтов стипендиант в Техническият университет във Фрайберг (Германия), Университета в Бризбейн (Австралия), гост-професор в Университета в Синсинати (САЩ) и Цукуба (Япония) и др.

Наукометрични параметри на дисертационния труд

Дисертацията на проф. Румен Цеков е написана на английски език и се основава на 35 научни публикации в специализирани международни списания с висок импакт фактор, които са цитирани 180 пъти (без автоцитати според статистика от SCOPUS). Тя е представена на 247 стр., като първите 38 от тях са обобщаващо резюме на приложените след това копия от всичките 35 публикации. Представените публикации в

дисертационния труд са 19 самостоятелни, 16 в съавторство, като в 31 публикации проф. Цеков е първи автор. Несъмнен е основният принос на автора в представените публикации. Цитираните според проф. Цеков 365 литературни източника е трудно да бъдат проверени защото представляват литературата приложена след всяка отделна публикация и е възможно да има някои повторения или пропуски. Авторефератът е представен както на български, така и на английски език, и правилно отразява основните приноси на проф. Румен Цеков. На практика авторефератът е точно копие на първите 38 обобщаващи страници от дисертационния труд.

Актуалност на проблема

Квантовата механика описва поведението на елементарните частици и физикохимичните явления в микросвета. За получаване на макроскопичните свойства на изследваните системи се използват осреднени глобални характеристики изведени с използване на статистическата механика базирана на математическите подходи от теория на вероятностите и стохастиката. Сложността и общността на подходите налага въвеждане на допълнителни предположения за да се достигне до явни (по-прости или сложни) зависимости. В редица случаи (дори и класически) тези предположения са взаимно изключващи се и противоречиви. Предложената дисертация е посветена на взаимовръзката между квантовата механика и Брауновото движение, един нерешен глобален теоретичен въпрос във физиката и химията. За адекватността на направените предположения и изведените зависимости свидетелства широкия спектър от обяснени експериментални факти.

Преглед на дисертационния труд и включените резултатите

Проф. Цеков е избрал нестандартен за нашата страна начин на представяне на резултатите в дисертационния труд. Литературният обзор е включен във всяка една приложена публикация конкретно по разглеждания проблем. Приложените статии са в реномирани международни списания преминали през сериозно рецензиране и това дава основание за приемане на разгледаното от автора моментно състояние на конкретното изследване и неговата актуалност в литературата. В уводната част на предложението дисертационен труд проф. Цеков се е опитал да обобщи вече общоприетите подходи към разглеждане на Брауновото движение от класическа, стохастична и квантово механична гледна точка. Според мен уводната част носи определен исторически характер, без да става ясно какви точно са конкретните приноси на цитираните учени и

какво е съвременното състояние на проблема. В известен смисъл това е направено във всеки раздел на дисертацията при мотивировката на конкретното изследване.

Същинската част на дисертационния труд се състои от три основни раздела, на които ще се спира поотделно.

Брауново движение на класически частици (уравнения на Ланжвен, Клайн-Краммерс и Смолуховски). Този раздел обобщава получените резултати в 14 публикации на проф. Цеков както следва [2,3,4,5,6,8,9,11,12,21,22,23,24,30]. Разглежда се Брауновото движение на системата когато атомите на системата са достатъчно тежки и тяхната квантова природа може да се пренебрегне (наречени класически частици). Както е известно детайлното поведение на една система от голям брой частици се определя от нейния Хамилтониан. Получената математическа задача на практика е нерешима в общия случай. Затова се въвеждат различни реалистични модели за опростяване и решаване на възникващите проблеми. Проф. Цеков разглежда твърди тела, в които атомите могат да вибрират около равновесните си положения. Това е довело до едно нетривиално обобщение на уравнението на Ланжвен. В допълнение акустичните фонони в твърди тела се описват достатъчно точно със спектъра на Дебай, което спомага да се разглеждат процесите като Марковски. Като важен резултат е възникването в резултат на тези предположения на тензор на триене зависещ от положението на частиците. Разгледани са редица частни случаи за да се даде адекватна представа за неговата природа. Методът е приложен от автора и за аморфни твърди тела. В случай на Марковски процеси еволюцията на плътността на вероятностите се подчинява на уравнението на Клайн-Краммерс, чието равновесно решение е каноничното разпределение на Гибс. Проф. Цеков доказва, че еволюцията на плътността на вероятностите в конфигурационното пространство се свежда до закони аналогични на хидродинамичните, т.е. за запазване на масата и импулса на системата, в които фигурира и конфигурационната ентропия. Верността на получените теоретични резултати е потвърдена експериментално, чрез количествено описание на данни свързани с резонансна дифузия. Обобщеното уравнение на Ланжвен е приложено от автора и за квантова околна среда, когато силата придобива характер на квантов шум. В резултат класическата дефиниция за температура се трансформира в оператор на температурата. Поради Гаусовия характер на квантовата сила квантовите уравнения на Клайн-Краммерс и Смолуховски се явяват естествено следствие от приложението на теоремата на Фуруцо-Новиков-Донскер. Ако термичните флуктуации се заменят с такива от друга природа (напр. движение на клетки поради виталност и активен

транспорт и др.), то получените резултати пряко се принасят и към живи организми, финансови пазари и т.н. при подходящо дефиниране на величините.

Брауново движение и квантова механика (уравнения на Маделунг, Винер-Лиувил и Лоренц). В този раздел от дисертационния труд са обобщени получените резултати в 11 публикации на проф. Цеков както следва [1,19,25,26,27,28,29,30,32,33,34]. Авторът показва дълбоко разбиране на основната първопричина за неуспешните опити да се получи квантовомеханичната представа чрез използване на Брауновото движение – способността на квантовите фотони да се разпространяват свободно във вакуум изисква моделирането на вакуума като силно дисипативна среда. В резултатът е получено отново обобщеното уравнение на Ланжвен, но вече със сила на триене, която не носи природата на Марковските процеси. Поради вероятностния характер на квантовата механика правилният път е преформулиране на законите за плътността на вероятностите в хидродинамично подобна форма аналогично на подхода на Маделунг. Това представяне е позволило на проф. Цеков да разкрие редица особености на вакуума, напр. че термичната свободна енергия трябва да се замени с квантовия (информационен) потенциал. При достатъчно бързи и нерегулярни колебания на квантовите частици системата може да премине в турбулентен режим, което довежда до разпадане на тензора на напрежение на две събираеми – изотропно налягане и диаден тензор на локално средната турбулентна скорост, който се свързва естествено със закон от типа на Фик, т.е. квантовата турбулентност има Браунов характер. Проф. Цеков не стига само до тук, а развива идеите и в по-общия им смисъл чрез разкриване на стохастичната динамика скрита в подхода на Вигнер-Лиувил. Тръгвайки илюстративно от най-простия случай (атома на водорода), авторът преминава и към общия случай на голям брой частици, който има напълно аналогична физична природа, естествено с доста по-сложно от математическа гледна точка описание. В случай на точкови частици се налага и въвеждането на многомерен векторен потенциал, което е в пълно съответствие с квантовата теория на полето. Удачното прилагане на условията на Ойлер-Лагранж за така разглежданата система от точкови частици е позволило да се сведе резултатът до аналог на уравнението на Лоренц-Ланжвен. Брауновият характер тук се проявява поради стохастичната природа на векторния потенциал, при това средната стойност на стохастичната сила е равна на нула. Прилагането на калибровъчната теория е дало възможност на проф. Цеков да разкрие начина на пренасяне на потенциалните взаимодействия чрез векторния потенциал. Този подход

може да бъде разглеждан като вариант на стохастична електродинамика, предимствата и/или недостатъците на който ще покажат бъдещи изследвания в тази област.

Брауново движение на квантови частици (уравнения на Бом и Калдейра-Легет и управляващ закон). Този раздел обобщава получените резултати в 16 публикации на проф. Цеков както следва [1,7,10,13,14,15,16,17,18,19,20,21,25,31,33,35]. Използвайки представянето на Бом и предположението, че квантовите частици се подчиняват на закон на Нютон под действие на квантовия потенциал, проф. Цеков е успял да изведе функционално стохастично уравнение от тип на Бом-Ланжвен и съответния им квантово-хидродинамично подобен аналог за локалните средни величини. Едно негово важно предимство е, че хидродинамично подобните уравнения са самосъгласувани и имат решения плътността на вероятностите и хидродинамично подобната скорост. При предположение, че инерционният член може да бъде пренебрегнат, естествено се получава връзка между скоростта и плътността на вероятностите. След заместване в уравнението за непрекъснатост е получено и „дифузионно“ уравнение от тип Смолуховски-Бом включващо оператора на Хамилтон. За да не се отчитат два пъти термичните флуктуации, авторът е въвел заместване на квантовия потенциал със свободната енергия на системата. В резултат е получено съотношение, което има равновесно решение точно съответстващо на равновесното термо-квантово разпределение. Тук възниква въпросът дали не би трябвало априори да се формулира проблема и изведат съответните уравнения, а не в крайния резултат да се налагат не достатъчно аргументирани замествания. Проф. Цеков правилно е отбелязал, че полученият резултат описва явленията в конфигурационното пространство, затова се налага да се изведе и съответният управляващ закон във фазовото пространство. Като цяло това е доста сложен и нерешен проблем в общия случай. Авторът е успял да получи оригинални резултати при опростяващото предположение за неструктурирани среди с коефициент на триене не зависещ от положението на Брауновата частица. В литературата широко се използва подхода на Калдейра-Легет, който има съществен добре известен недостатък – неточно равновесно разпределение. Чрез прилагане на принципа на Онзагер проф. Цеков е успял да получи подобро управляващо уравнение, в което матрицата на плътността на Гибс се явява равновесно решение (както би трябвало да бъде). Поради нелинейния характер на така получения резултат естествено се нарушава принципа на суперпозиция. Авторът детайлно се спира на този проблем и задълбочено изследва различните варианти на частично и пълно линеализиране, които в крайна сметка довеждат до нови и/или известни резултати от

литературата. Получените в този раздел нови теоретични резултати се нуждаят от експериментално потвърждение и затова би било удачно проф. Цеков да предложи и подходящ сценарий на експерименти, които еднозначно да докажат или опровергават изведените теоретични зависимости.

Оценка на основните приноси в дисертационния труд

Основните приноси в дисертационния труд са групирани в 10 точки формулирани на стр. 35 и 36 от Дисертацията и на стр. 39, 40 и 41 от Автореферата. С изброените приноси съм съгласен – те отразяват адекватно в сбита форма достиженията на проф. Румен Цеков. Аз бих представил приносите както следва:

В областта на класическата механика. Изведено е обобщено уравнение на Ланжвен за произволна механична подсистема намираща се в хармонична среда на твърдо тяло. Получената връзка между тензора на триене и потенциала на взаимодействие обяснява нееднородността на коефициента на триене в структурирани среди. Резултатите са приложени за адекватно количествено описание на експериментални данни за нормални алкани в зеолити. За общността на подходите свидетелства и оригиналното им прилагане за описание на живи клетки.

В областта на квантовата механика. Ефектът на квантовите осцилатори върху Брауновото движение е отчетен чрез въвеждане на оригинален оператор на температурата. Това довежда до самосъгласувано извеждане на квантовите уравнения на Клайн-Крамерс и Смолуховски. Теоретичното изследване на модела на Брауновите емитери и изведените еволюционни уравнения за плътността на вероятностите еднозначно отхвърлят една от хипотезите на стохастичната електродинамика, че движението на един електрон във флукуационното поле на нулевата енергия във вакуум води до получаването на класическото уравнение на Шрьодингер. Доказано е, че отчитането на ударите между точковите частици и виртуалните квантови частици, които транспортират основните взаимодействия между тях, са природата за заложеното в квантовата механика уравнение на Шрьодингер.

В областта на стохастиката приложена към квантовата механика. Изведеното от автора стохастично уравнение от тип на Лоренц-Ланжвен чрез оригинална калибровъчна трансформация е доведено до това на Шрьодингер. Получено е описание на Брауновата динамика в рамките на механиката на Бом. Чрез извеждането на общ нелинеен управляващ закон, авторът е успял да получи редица важни обобщения: оригинален закон за разпръскване на вълновия пакет; квантово обобщение на

класическия закон на Айнщайн за Брауново движение; нови дисипативни модели на Шрьодингер и Лиувил.

Забележки и препоръки

Дисертационният труд хвърля мост между Брауновото движение и квантовата механика. Този въпрос е от принципно значение за разбирането на редица процеси, явления и теоретични подходи във физикохимията, хидродинамиката на комплексни флуиди, и др. области. Използването на имената и достиженията на плеада изтъкнати учени без задълбочен анализ и цитиране на техни публикации в обобщаващия материал на първите 38 стр. не дава представа за трудния път и предположенията за получаване на класически вече резултати. Според мен е удачно проф. Румен Цеков да подготви монографичен труд по застъпените в дисертацията проблеми, в който последователно и методично да са изложени съвременните достижения в тази област както и тези на автора, които са от несъмнено значение за теоретичната химия и физика.

Заключение

Дисертационният труд представя проф. д-р Румен Цеков като задълбочен учен с изграден собствен подход към формулиране и решаване на сложни теоретични проблеми в областта на физикохимията. Дисертационният труд е подготвен самостоятелно, несъмнено е дело на автора и не повтаря и съдържа резултати представени за придобиване на научната степен „доктор“. Представената за рецензия дисертация напълно отговаря на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за приложението му и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“. Въз основа на гореизложеното давам своята положителна оценка на дисертационния труд и препоръчвам на уважаемото Научно жури да присъди единодушно научната степен „доктор на науките“ в професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия) на проф. д-р Румен Цветанов Цеков.

София

27.08.2021 г.

чл.-кор. проф. д-мн Красимир Димитров Данов