

РЕЦЕНЗИЯ

върху дисертационен труд за получаване на образователната и научна степен “доктор”

Автор на дисертационния труд: Кати Исак Аврамова

Тема на дисертационния труд: “Конформационни и динамични свойства на линейни полимерни молекули в присъствие на геометрични ограничения и/или под действие на хомогенно външно поле”

Рецензент: Веселин Димитров Тончев, д-р, доцент в ИФХ – БАН

I. Общи положения и кратки биографични данни за кандидата.

Кати Исак Аврамова (р. 1973 г.) завършва Химическия Факултет на Софийския Университет „Св. Климент Охридски“ като магистър със специализация по „Химична физика и теоретична химия“ и започва редовната си докторантура си в ИФХ – БАН през 1999 г. През 2001 г. е отчислена като докторантка с решение на НС на ИФХ с право на защита. Краят на срока на докторантурата е отбелязан и със самостоятелна публикация на дисертантката в Crystal Research and Technology, върху която открих общо 6 цитата. Тази публикация не е включена в рамките на дисертацията, затова я споменавам тук, като част от преценката на способността на г-жа Аврамова за самостоятелни изследвания. Т.е. може да се допусне с голяма степен на достоверност, че към 2002 г. Кати Аврамова е един вече завършен и, вероятно, обещаващ млад изследовател. В следващите 12 г. тя е химик в същия институт, като е добавила в автобиографията си, че в този период дейността ѝ е била по „разработване на софтуер“. Действително, представеният от нея списък с разнообразни умения в тази област е внушителен, а и съм сигурен, че е реален. Наскоро Кати Аврамова представи пред колоквиума „Странски – Каишев“ дисертационен труд и след съответните решения на колоквиума и на научния съвет на ИФХ, този труд е обект и на настоящата рецензия.

II. Описание на представените материали

За рецензиране са представени следните документи:

1. Дисертационен труд върху общо 160 стр. с единна номерация, състоящ се от 16 глави. Разпределението на материала на дисертацията в тези 16 глави е неравномерно. Например последната 16-та глава, наречена Послеслов, заема едва една и половина страници и в нея дисертантката се е опитала, според мен безуспешно, да запълни празнината между последната си публикувана статия (от 2006 г.) включена в дисертацията и времето на защитата, т.е. около 7 години. Малко по-голяма е глава 9 – върху „цели“ 3 стр. и обхваща 5 уравнения, една „картинка“ и една графика. Глава 4 ми се видя безсмислена в по-голямата си част, защото в следващите глави не е използвано почти нищо от въведеното в

тази глава, например понятията „матрица на прехода” и “граф на прехода”. Тя явно не е и приносна, уравнения от 4.2 до 4.12 са копирани като изображения без позоваване на източник, освен изброените в началото на главата. Други глави също оставят усещането, че са по-скоро части от по-общи и логически цялостни глави, например тези с номера 3, 6 и 7 (които биха формирали една обща), 10. Тази излишна според мен фрагментарност е избегната частично с по-нататъшното групиране на главите в три обособени и сравнително ясни като логическа свързаност части. В някои от заглавията на главите всички думи са с главни букви, а в други – не, което би могло да се избегне сравнително лесно.

Дисертацията съдържа още:

- 61 фигури, които следват номерацията на съответните глави, 25 от тях имат илюстративен характер (схеми и др.), като някои от тези илюстрации съдържат оригинални резултати от изследванията на докторантката. Специално фигурите, онагледяващите качествените и количествените аспекти от авторските изследвания са с много високо качество, като някои от тях са наистина впечатляващи, и показват висока, бих казал рафинирана, култура за научна визуализация. Само в труд от подобен размер тази култура може да се прояви наистина пълноценно. Забелязват се и някои неточности, например подфигурният текст към фиг. 1.2 е останал зад фиг. 1.3, в подфигурния текст на фиг. 12.9 не е обяснено какво е показано на вложената графика, на фиг 13.5. не е ясно какво е обозначението върху оста x , в легендата на фиг 13.8 (наречна „плот“) се появява $\text{slope}-1$ и не става ясно какво се има в предвид, вероятно, че наклонът на правата е равен на (-1) . Фигура 11.10, 11.11, 13.10 и 13.14 са наречени „скейлингов плот” и макар да съм наясно колко е трудно понякога да са намери адекватен превод, съм убеден, че в случая това е един неприемлив жаргон. Не е ясно авторството на фигури 1.1 до 1.6, 1.8, 2.1, 3.1 до 3.3, 4.1, 6.1, те са и с открояващо се ниско качество. Същото може и да се каже за уравненията в гл. 5 (5.4 – 5.14) – те са с много ниско качество, различно от това на уравненията в другите глави, изглеждат като копирани от друго място (предишни версии на дисертацията?) в опит на авторката да си спести набирането им наново.

Номерацията на уравненията (общо 201), с изключение на тези в уводната част, следва тази на главите, в които се появяват. Използването в текста на съкращението „ур.“ при позоваване към уравненията ми се видя малко непривично, макар и да е ясно, че се явява директна транскрипция на английския модел. Една справка с наскоро защитена дисертация не можа да разсее съмненията относно правилността на използването му, а българското списание за наука „Химия” използва в такива случаи цялата дума - „уравнение”.

Изводите са отделени в глава 14-та и са общо 15, но извод 5, всъщност не е извод, а по-скоро първо изречение на извод 6 и евентуално на извод 7, ако бъдат разгледани отделни. Изводи 10 и 11 са всъщност един общ извод. В извод 13 трудно може да бъде разпознат оригиналният извод на стр. 133, описващ

увеличението на диаметъра на тръбата в раздутата част. Като съдържание изводите правилно отразяват текущите изводи, направени в основния текст на дисертацията и, взети в тяхната цялост, са коцентриран и много убедителен образ на голямата по обем и качество работа, която Кати Аврамова е извършила, бих казал и с ръцете си и с ума си, подготвяйки тази дисертация и получавайки резултатите в нея. Не знам дали тук е най-доброто място за това, но не бих искал да подмина и факта, че изводите (и приносите) отразяват достатъчно ясно и плодотворното взаимодействие, което са имали през годините докторант и ръководител.

Глава 15 от дисертацията е посветена на приносите на този труд. Те са 6 на брой, съдържат много коцентриран и адекватен израз на получените резултати и аз ги приемам като такива напълно. Действително, преминавайки от същината на дисертацията, Част 3 (и отдалечавайки си е от не толкова фокусираните предишни части), към изводите, а после и към приносите, читателят осъзнава, че Кати Аврамова, а и ръководителят ѝ на едно по-концептуално ниво, не само са извършили голяма по обем работа, но са я съчетали успешно с началната визията за това какво има да правят и с осмислянето на полученото. Крайният продукт е впечатляващ!

Библиографията включва 139 източника. Не съм проверявал дали всички се появяват в текста на дисертацията. Най-ранният източник е от 1906 г., от периода 2002 – 2006, т.е. след отчисляването на Кати Аврамова като докторантка, са 8 източника, а след 2006 г. – 2. Това дава известна представа за времето, в което дисертацията вече е била готова, поне на концептуално ниво. Усещането за „отложена актуалност“ се засилва от споменаването в текста, стр. 69, на статии от периода 1993 – 1995 г. като проява на „голям научен интерес напоследък“ (тук директно преводачасти от статиите е подвеждащ). Има и някои технически неточности, например за източник с номер 37 не е ясно къде е публикуван, макар и да е указана годината на публикуване, а в източник 49 се появяват две години на издаване (1993 и 1997), източник 122 пък е непълен.

В дисертацията е включен списък с работите, върху които тя е изградена (Приложение А от частта с приложенията). Той съдържа 3 статии в списания с импакт фактор и една в книга с материали от конференция на НАТО, издадена от Шпрингер. Този набор от публикации надвишава критерия, поставен от НС на ИФХ – БАН за допускане до защита за придобиване на ОНС „доктор“.

Приложеният списък от 12 цитата (Приложение Б) върху тези статии отговаря положително на въпросите около актуалността на изследванията в дисертацията към днешна дата. Няма да пропусна да отбележа малко странния начин на групиране на цитатите, точно обратен на приетия шаблон в секцията/института/.

Към края на този анализ на дисертацията ще отбележа и някои грешки, които не мога да подмина. Три пъти на стр.12 е използван терминът *gosh*, като при първата поява е цитиран и източникът под номер 3 (книга с автор М.В.

Волкенщайн). Опитвах се да изясня откъде е произлязла грешката, но не успях. Вярно, че на руски може да бъде срещнат изписан с кирилица, но при Волкенщайн е използвана първата буква само, каквато е и препоръката на IUPAC, а в „библията” на де Жен (номер 122 от списъка с литературни източници) навсякъде се използва пълното изписване „gauche”. се появява и на копираната отнякъде фигура 1.4 и прави още по-неуместна терминологичната грешка в текста. Джон фон Нойман пък се появява в текста като Джон Фон Нюман (стр.34), а Станислав Улам – и като Улман. Надявам се още, че „треактория” и „хамилтониян” са само правописни грешки.

Сега вече ще се спра по-подробно на главите, които смятам за съществени при оценката на дисертацията и на важни резултати в тях. Това са преди всичко трите глави от Част 3 с номера от 11 до 13, те отговарят точно (на моменти буквално) на трите публикации, върху които е построена дисертацията и затова няма да се спирам на публикациите отделно. Разбира се, уводните части 1 и 2 имат своята стойност, особено за читатели, които тепърва се запознават с областта на теоретичните и симулационни изследвания върху свойства на полимерни вериги, и в тези части бих открил глави 1 и 2, посветени на конформационните свойства и динамиката на полимерна верига и глава 8, която открехва завесата към тайните на занаята, а именно използваните Монте Карло техники, съчетана евентуално с глави 9 и 10, посветени на използваните потенциали и измерваните величини. Тези трите последни глави, 8, 9 и 10, биха могли да формират и една само, съдържащата цялата „работилница”.

Глава 11. „Полимерна верига с фиксиран край ..“ отговаря на публикацията „A Monte Carlo study of a tethered polymer chain in a uniform field“ с автори Аврамова, Ямаков и Милчев, излязла през 2000 г. в списанието *Macromolecular Theory and Simulations*. Това изследване е насочено към проверка на теоретични предсказания на Brochard за съществуването на две критични външни полета, разделящи три режима на слабо, междинно и силно разпъване на полимер с фиксиран краен мономер. Намерени са степенни изрази за стойността на критичните полета като функция от броя мономерни в полимера, както и три вида плътностни профили на удължения полимер. Също е намерен и степенен израз за релаксационното време към набухнато кълбо, пак в термините на брой мономерни в полимера. Като цяло това е едно подробно и много убедително изследване, без което теорията на Брошар би била само едно красиво интелектуално упражнение.

Глава 12 „Провиране на полимерна верига ...“ отговаря на изследването, наречено „Drift of a polymer chain in a porous medium —A Monte Carlo study“ с автори Аврамова и Милчев, публикувано през 2002 г. в *European Physical Journal E*. Тук краят на полимера вече не е фиксиран, а само маркиран/зареден. Така хомогенното външно поле тегли, а не удължава полимерната верига. Намерени са степенни изрази за надлъжната и напречна промяна на размера на веригата, отново като функция на броя стъпала в нея и интензитета на полето. Явлението задръстване е наблюдавано за първи път, без предишно теоретично

предсказание, като е намерена критична стойност на полето, над която това се случва, тя намалява линейно с концентрацията на препятствия в средата. Направи ми силно впечатление и още един резултат от това изследване – за скоростта на преминаване на полимер през порьозна среда като функция на интензитета на полето и броя мономерни, в която зависимост самат степен зависи линейно от концентрацията на препятствията. Този резултат в началото ми се видя контраинтуитивен.

Глава 13 „Полимерна верига в мека нанотръба ..“ съответства на изследването „Polymer chains in a soft nanotube: A Monte Carlo Study“ с автори Аврамова и Милчев и публикувано през 2006 г. в Journal of Chemical Physics. Веднага ще отбележа впечатлението си, че в това изследване приносът на Кати Аврамова е най-разгърнат и съществен. Установено е какво е поведението на деформацията на меката тръба, а от друга страна е намерено и какво е удължението на полимерната верига в такава тръба, намерена е степенна зависимост на дифузионния коефициент на веригата като функция на броя мономерни, както и релаксационното време за дифузионно движение покрай оста на тръбата, пак като функция от броя мономерни.

2. Автореферат. Съдържа 47 стр. и 48 фигури, следващи единна номерация (за разлика от дисертацията), 111 литературни източника, като изводите формулирани в дисертацията са наречени тук „обобщение на резултатите“ а принос 6 от дисертацията в автореферата е претърпял известно съкращение. Намирам, че авторефератът пълноценно и адекватно отразява съдържанието и акцентите в дисертацията, като, бих казал, подчертава силните ѝ страни.
3. Представени са копия от публикациите, включени в дисертацията. Както вече отбелязах в коментарите към дисертацията, броят на публикациите – 3 в списания с импакт фактор и една в книга, отговаря на количествените критерии заложи в Правилника на ИФХ – БАН за допускане до защита за придобиване на ОНС „доктор” .
4. Представени са изискваните справки – за приносите, списък на включените в дисертацията публикации, списък на всички публикации, както и общ списък на цитатите върху всички публикации, в първа част, на който са отделени цитатите върху работите от дисертацията.

III. Обща характеристика на научно-изследователската и научно- приложната дейност на кандидата.

В тази част от рецензията си ще се спра на научно-изследователската дейност на Кати Аврамова, допускайки, че научно-приложните аспекти в дейността ѝ са до голяма степен пренебрежими. Вече имах възможността да изразя принципното си положително отношение към работата на Кати в рамките на подготовката на дисертацията ѝ. Тя е един завършен изследовател в областта на компютърните симулации на сложни, многочастичкови, моделни системи, който може да изгради необходимите програмни ресурси практически от нулата и да проведе сложно и многопараметрично търсене с използване на съвременните хардуерни

възможности, а в края на това търсене да осмисли полученото и да отиде отвъд първоначалните очаквания. Изглежда, напоследък се е насочила и към провеждането на експериментална дейност, но смятам, че, би било разточителство да остане в руслото на експериментите, нейната сила е именно в компютърното моделиране.

I. Основни научни и научно-приложни приноси.

За мен личният принос на Кати Аврамова за написване на дисертационния труд, както и за получаване на резултатите, представени в него, е несъмнен, „почеркът“ ѝ е достатъчно специфичен за да остави у някого съмнения в това. Ясно е, че е направила всичко в този труд от начало до край, разбира се, под внимателния и много взискателен поглед на ръководителя си. От формална гледна точка, представените трудове напълно покриват изискванията на Правилника на ИФХ - БАН. Те могат да бъдат характеризирани като обогатяване на съществуващи знания и теории, макар, че е докладван и нов, непредсказан ефект – задръстване, а и няма да бъде пресилено ако наречем теорията на Брошар „теория на Брошар-Аврамова-Ямаков-Милчев“.

Отражение на научните публикации на кандидата в българската и чуждестранната литература – забелязани за общо 12 цитата върху работите в дисертацията. Критичните бележки са разположени в рецензията ми и няма да ги повтарям тук, специални препоръки към научните трудове на кандидата нямам. Личните ми впечатления за кандидата не са кой знае какви, но съм сигурен в едно – тя може да прави нещата, които е събрала в тази дисертация и би било жалко ако не продължи да ги прави и занапред.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Общата оценка на представените ми дисертация, автореферат и научни трудове с автор Кати Аврамова е положителна и аз убедено препоръчвам на научното жури да предложи на Научния Съвет на ИФХ – БАН да присъди на Кати Исак Аврамова ОНС „доктор“ в научната специалност „Физикохимия“.

София, 15.10.2013 г.

Рецензент:

/ доц. д-р Веселин Тончев /