

РЕЦЕНЗИЯ

от д-р Аля Витали Таджер

професор по Теоретична химия в Катедрата по физикохимия на Факултета по химия и фармация при Софийския университет "Св. Климент Охридски"

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен 'доктор'

в област на висше образование **4. Природни науки, математика, информатика**
професионално направление **4.2. Химически науки (Физикохимия)**

Дисертант : Кати Исак Аврамова – Институт по физикохимия „Ростислав Каишев” - БАН с научен ръководител: проф. дн **Андрей Иванов Милчев**

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

1. Предмет на рецензиране

Със заповед № 52 от 11.07.2013 г. на Директора на ИФХ-БАН съм определена за член на научното жури по процедура за защита на дисертационен труд за придобиване на ОНС 'доктор'

Представеният от магистър **Кати Исак Аврамова** комплект материали на хартиен и електронен носител е в съответствие със ЗРАСРБ и Правилника за развитие на академичния състав на ИФХ-БАН.

Дисертацията е базирана на 3 публикации в престижни международни специализирани списания с импакт фактор и една публикация в сборник от НАТО конференция, издание на Springer. С това изискванията заложи в чл. 5 (4) от Правилника на ИФХ-БАН за приложение на ЗРАСРБ са напълно удовлетворени.

2. Кратки биографични данни

Кати Аврамова е родена през 1973 г. Тя е възпитаник на ХФ при СУ: завършила е през 1997 като магистър в специализация „Химична физика и теоретична химия”, зачислена като редовен докторант в ИФХ-БАН през 1999 г. и отчислена с право на защита през 2001 г. От 2002 г. до днес заема длъжност химик в ИФХ-БАН.

Дисертационният труд е обсъден, одобрен и насочен към защита на заседание на Колоквиума/Научния съвет на ИФХ-БАН проведено на 10.07.2013 г.

3. Актуалност на тематиката и целесъобразност на поставените цели и задачи

Актуалността на разработваните в дисертационния труд проблеми е извън всякакво съмнение както във фундаментално-научно, така и в научно-приложно отношение. Моделирането на поведението на линейни макромолекули поставени в условия на ограничения както от полеви, така и от вешевеи характер, е обект на нестихващ интерес от десетилетия. Тематиката е привлекателна както за специалистите по физикохимично поведение на полимери, така и за изследователите на динамиката на биомacroмолекулите, преобладаваща част от които са линейни или квазилинейни по контур. Постигането на резултати в тази област, използвайки прогностичния потенциал на компютърния експеримент базиран на обобщено молекулното моделиране, е пионерен подход за времето на изработване на публикациите и не е загубил своята ценност и до днес.

4. Обща характеристика и оценка на дисертационния труд

Дисертацията обхваща 152 страници + приложения, 17 илюстративни фигури и 44 графики. Структурирана е в 15 раздела, литература и 3 приложения. Общата част обхваща първите 10 раздела. Направен е литературен обзор на подходите за моделиране на статичните и динамични свойства на линейни полимерни вериги. Изложени са основните понятия, представи и зависимости в използваните методи от статистическата физика. Представянето на последните варира от свръхсимплистично до напълно професионално, което показва от една страна свободно владееене на формализма и от друга – стремеж към популяризаторски стил, чиято уместност намирам за спорна в рамките на един дисертационен труд. Има и някои дребни неточности и пропуски, както и известен брой недефинирани обозначения.

Следващите три раздела са посветени на компютърния експеримент като е следвана една и съща структура, разглеждаща последователно мотивацията, специфични за задачата теоретични елементи, симулационен модел и статични и динамични свойства извлечени чрез статистическа обработка на резултатите. Намирам, че тук изложението е напълно изчерпателно. Използвани са 139 литературни източника, които като подбор и обем свидетелстват, че докторантката се е запознала както с класиката, така и с разработките до 2006 г. в областите засегнати в дисертацията.

Трите дяла на Специалната част са посветени на 3 различни сценария на ограничение в движението на (квази)линейните макромолекули: 1) приложено насочено постоянно поле при фиксиране на единия край на верига без явно обкръжение; 2) приложено насочено постоянно поле, въздействащо само на един активен край на веригата в инертна неподредена среда, симулираща порест материал; 3) движение/теч през еластична инертна тръба в имплицитна среда от добър разтворител. Във всички случаи е проследена зависимостта на статичните и динамични характеристики от дължината на веригата, от интензитета на приложеното поле, плътността на средата или диаметъра на ограничаващата среда, ако има такива. Типичните характеристики, които са следени са радиус на въртене, разстояние между краищата на веригата, дължини на връзки, профили на плътността или средно отместване на отделни фрагменти и техните времеви зависимости.

Изследванията по първата задача позволяват да се очертаят 3 режима на изпъване, да се определят критичните стойности на интензитета на полето, които ги сепарират и да се намери връзката на последните с контурната дължина на полимера и с неговата форма. При изключване на полето системата релаксира до статистическо кълбо, следвайки модела на Раусова динамика. Смятате ли, че резултатът ще е същият, ако приложите поле в обратна посока?

При симулациите свързани с втората задача са намерени различни зависимости на радиуса на въртене в надлъжно и напречно направление от броя на мономерите във веригата (N) и силата на полето, като е установен и обяснен ефектът на задръстване при силни полета и/или висока концентрация на препятствията.

При дифузията на линеен полимер в мека непронусклива тръба е регистрирана цилиндрична (за разлика от очакваната сферична) деформация с размер пропорционален на N , като при големи стойности на N твърдостта на стената не играе значителна роля. Наблюдавано е намаляване на подвижността, по-значително в тесни тръби, въпреки че е изключено атрактивното взаимодействие между веригите и тръбите.

Въз основа на проведеното изследване е направено основателното заключение, че заложените цели на изследването са постигнати успешно.

5. Познаване на проблема. Подбор на методика на изследването

От изложението личи, че докторантката се е запознала с проблематиката във всички нейни аспекти и е в състояние да коментира постигнатото от други автори критично и конструктивно. Целите са поставени ясно. Намирам, че избраната методика

на изследване позволява до голяма степен постигане на поставената цел и получаване на адекватен отговор на задачите, решавани в дисертационния труд. В конкретни случаи са посочени доверителните граници на метода.

При описанието на структурните характеристики е използван модел на низ от блобове. Не успях да намеря оригиналните работи, въвеждащи този модел, но от дефиницията останах с впечатление, че броят на мономерите в един блоб не е фиксиран, докато от представения формализъм като че следва, че всички блобове съдържат еднакъв брой мономерни звена. Ще помоля дисертантката да поясни този модел и да прецизира доколко може да се говори за извличане на конформационни характеристики с негова помощ. Понятието конформация, както правилно е описано в дисертацията, е свързано най-вече с вариация на торзионни ъгли, за каквито изобщо не става въпрос в представеното изследване. Описанието на динамичното поведение е съпоставено с моделите на Раус, Зим и Едуардс, които също са доста обобщени. В тях общата дължина на веригата остава постоянна, като не се отчитат конформационни промени, които водят до скъсяването/удължаването ѝ и се приема, че настъпващият и отстъпващият край се движат с еднаква скорост. Прекъсването на двата вида потенциали в една и съща точка, отговаряща на l_{max} е също доста необичайно. Разбира се като първи компютърни експерименти върху изучаваните системи са търсени най-общите закономерности и в този смисъл подборът на методи на изследване и модели е напълно оправдан.

6. Приноси и значимост на разработката за науката и практиката

Всяка от трите глави на специалната част завършва със „Заключение“, в което е резюмирано установеното в хода на изследването. В добавка, Глава 14 отново изброява съвсем същите моменти под названието „Изводи“ – 15 на брой, които са по-скоро обобщение.

За сметка на това в Глава 15 са формулирани, макар и многословно, 6 приноса, които наистина отразяват адекватно пионерните елементи в научно отношение на проведените изследвания.

Приносите от разработката в тази дисертация са както от фундаментален, така и от приложен характер. Най-общо те биха могли да се класифицират като: *разширяване на съществуващи знания, предлагане и валидиране на нови хипотези, трасиране на пътя за решаване на научни проблеми с интердисциплинарен характер и значимо практическо приложение.*

7. Преценка на публикациите по дисертационния труд. Лично участие на автора

Резултати от дисертацията са включени в 3 научни публикации: една в *Macromolecular Theory and Simulations* (IF=1.348), една в *European Physical Journal E* (IF=2.188) и една в *Journal of Chemical Physics* (IF=3.166), копия от които са приложени към документацията (IFs са за съответната година). Всички статии са на английски език.

Първата статия е от 2000 г., посветена е на първия изследван проблем; втората е от 2002 и атакува втората цел, а третата е от 2006 и описва моделирането на третата задача.

Първата статия е с 3 автори, а втората и третата са с по 2 автори като дисертантката е първи автор и в трите и постоянен съавтор е научният ъ ръководител. Съдейки по написаното в дисертацията, считам, че докторантката е участвала в подготовката и провеждането на симулациите, както и в анализа на резултатите във всички етапи на изследването.

Освен в статии резултатите са представени от дисертанта и на 2 национални докторантски научни форума като устни съобщения и на международната школа на НАТО в Созопол през 2005 в постерен доклад.

Забелязани са цитати по публикациите: 1 по първата, 2 по втората и 9 по третата. Представените от дисертанта цитати датират както от години близки до датата на публикуване на статиите, така и до 2012 г. и са без изключение в реномирани списания. Това е свидетелство за научен интерес към изследванията на г-жа Аврамова.

8. Автореферат

Авторефератът вярно отразява основните резултати, постигнати в дисертацията. Всъщност в него се съдържа почти цялата дисертация. В този си вид авторефератът успешно може да послужи като помагало за магистранти/докторанти, които биха желали да навлязат в тематиката.

9. Критични забележки, въпроси и препоръки

Работата е написана на добър научен език, но има какво да се желае в техническо отношение. Правописните и пунктуационни грешки са малко (не мога да не спомена gosh), граматическите са предимно в неправилното членуване при страдателен залог, но форматните са доста – заглавия и собствени имена, започващи с малка буква; отделни думи ненужно с главни букви; повторени части от параграфи; липса на цитати към някои фигури, които са взети от литературни източници и др.

Не съм поборник за чистота на българския език – това не е постижимо във век на глобализация и във време, когато информацията се разпространява светкавично и новите термини влизат в употреба с такава скорост, че неизбежно придобиват гражданственост на езика, на който са използвани за пръв път. Все пак за термини, за които има български (или поне вече възприет чужд) еквивалент, намирам за желателно последният да се използва. В този смисъл не одобрявам употребата на ‘онсет’, ‘ран’, ‘разброс’, ‘гирационен` радиус и др.

Има и известни смислови повторения, които е можело да се избегнат. Въпреки това дисертацията се чете с лекота и е едно увлекателно четиво. Жалко е, че фигурите не са отпечатани в цвят, но размерът на графики и надписи по тях е отлично подбран.

Във всички случаи са използвани едни и същи параметри на потенциалите, една и съща температура, полимери с еднакви по размер мономерни звена и дори порестата среда е формирана от елементи със същия размер. Правени ли са опити за отклонение от тази унификация? Ако са правени, как влияе промяната в тези фактори? Ако не са, как мислите, че би повлияла?

Както казват англичаните: “The proof of the pudding is in the eating”. Най-убедителното доказателство за приносния характер на представеното изследване е неговото отражение в научната литература, а най-неоспоримият аргумент за актуалността на проблема е неговото продължаващо присъствие в изследователските тематики, развитието и усъвършенстването на моделите и методите за неговото изясняване. Това е и последният ми въпрос към дисертантката: да опише накратко текущото състояние на проблемите застъпени в дисертацията и в каква степен по-новите изследвания стъпват на публикациите с нейното авторско участие. Очаквах да видя това в заключителната глава ‘Епилог’, но в нея са дадени 2 примера за приложния аспект на изследването, не и за научния.

10. Лични впечатления

Личните ми впечатления от докторантката са предимно от студентските ѝ години. Както при повечето деца произхождащи от семейства на научни работници, научните методи за нея не бяха нов начин на мислене, а единственият познат. Запомнила съм критичното ѝ отношение към поднесенния материал и активния подход в подготовката.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На базата на класически Метрополис Монте Карло симулации са определени статични и динамични характеристики на линейни макромолекули поставени в условия на различни по характер ограничения. Потвърдени или уточнени са емпирично установени от други автори зависимости и са установени и интерпретирани нови такива.

Дисертационният труд *съдържа научни и научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката* отговарят на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България, Правилника за прилагането му и Правилника на ИФХ-БАН.

Дисертационният труд показва, че дисертантът притежава необходимите теоретични знания и професионални умения, способност за провеждане на самостоятелни изследвания с получаване на оригинални и значими научни приноси.

Поради гореизложеното, убедено давам своята *положителна оценка* проведеното изследване и *предлагам на почитаемото Научно жури да присъди образователната и научна степен 'доктор'* на **Кати Исак Аврамова** в област на висше образование 4. Природни науки, математика, информатика; професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия).

София, 28.09.2013 г.

проф. д-р Аля Таджер