

Становище

относно дисертационен труд на тема: „Молекулно моделиране на фазови преходи на граница вода-алкан: роля на повърхностно активните вещества и кривината“, представен от **Стоян Илианов Илиев** за присъждане на образователната и научна степен „доктор“ по ПН 4.2. Химически науки (Теоретична химия – Изчислителна химия)

от Наташа Трендафилова, ИОНХ – БАН, проф. д-р (пенсионер)

Стоян Илианов Илиев завършва Факултета по Химия и Фармация на Софийски университет „Св. Климент Охридски“ в 2020 г. Той се дипломира с пълно отличие и професионална квалификация „Магистър по Компютърна химия – Изчислителна химия“. В същата година е зачислен като редовен докторант по докторска програма „Теоретична химия – Изчислителна химия“ към Катедра „Физикохимия“, с научни ръководители проф. д-р Анела Иванова и акад. проф. д-р Николай Денков. В 2023 г., с решение на Факултетния съвет на Факултета по химия и фармация (Протокол № 26/21.07.2023) и електронен доклад от Декана на Факултета по химия и фармация (вх. № 70-07-545/24.07.2023), Стоян Илиев е отчислен с право на защита. Дисертационният труд е обсъден и насочен за защита от катедрен съвет на Катедра „Физикохимия“ на Факултета по химия и фармация на Софийски университет, състоял се на 02. 09. 2024 г.

Справката за изпълнението на минималните национални изисквания по чл. 2б от Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) за ПН 4.2. Химически науки (Теоретична химия - Изчислителна химия) показва категорично, че Стоян Илианов Илиев изпълнява и надвишава минималните национални изисквания за присъждане на образователната и научна степен „доктор“. В приложената Декларация за авторство, Стоян Илиев декларира, че представеният дисертационен труд е негова оригинална разработка по време на обучението му по докторска програма „Теоретична химия – Изчислителна химия“. В допълнение, процедурата за проверка на оригиналността на дисертационния труд, чрез използване на специализирана система за превенция срещу плагиатство, интегрирана в средата за електронно обучение в Софийски университет, не е регистрирала плагиатство.

Структурата, обемът и съдържанието на дисертационния труд на Стоян Илиев отговарят на изискванията на ЗРАСРБ и на допълнителните критерии за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ във Факултета по химия и фармация на Софийски университет за ПН 4.2. Химически науки. Дисертационният труд е написан на 114 страници и има следната структура: Увод, Литературен обзор, Изчислителни методи, Резултати и обсъждане, Заключение, Приноси и Литература, цитираща 72 заглавия. Авторефератът отразява коректно съдържанието на дисертационния труд.

Литературният обзор представя известните до момента експериментални и теоретични изследвания по темата, провокирали интереса на докторанта към надграждане и развитие на теоретичните модели и на изчислителните процедури. Текстът на дисертационния труд и илюстративният материал (62 фигури, 49 уравнения и 17 таблици) дават ясна представа

за значението на темата, за обема на проведените изследвания, за конструираниите теоретични модели, за използваните изчислителни методи и изведените зависимости.

Темата на дисертационния труд е актуална и значима за науката, тъй като проведените теоретични изследвания откриват възможности да се предвиждат и контролират свойствата на алкан-съдържащи системи чрез предварително изучаване на термодинамичните и структурните характеристики на техните надмолекулни формирания и възможните фазови преходи между тях. Темата има и конкретно практическо значение за петролната и фармацевтичната индустрии, където твърдотелните системи, съставени от нормални алкани, имат приложения.

Основна цел на описаните в дисертационния труд изследвания е теоретичното изучаване на фазовите преходи на граница вода-алкан с акцент върху ролята на повърхностно активните вещества и кривината. Посредством компетентно и изчерпателно молекулно моделиране, моделната система от хексадекан е изследвана в детайли на молекулно ниво. Изучено е поведението на хексадекан след замръзване. Предложени са два модела за описание на процеса на замръзване на хексадекан-съдържащи системи, в които е известно, че може да съществува преходна ротаторна фаза. Оценен е ефектът на ПАВ върху процеса на замръзване и типа на получената подредена фаза. Проведени са коректни молекулно-динамични симулации с предварително валидирано силово поле CHARMM36. Изследвани са основни термодинамични характеристики като профили на енталпията и плътността.

Основен принос в дисертационния труд е разработването на оригинален изчислителен протокол за провеждане на класически атомистични молекулно-динамични симулации на хексадекан-съдържащи системи, при които успешно се моделират и възпроизвеждат преходи от регулярна решетка на хексадекан към изотропна течност (стапяне) и от изотропна течност към подредено състояние (замръзване). С така предложения протокол, е осветлен механизмът на замръзване на обемен хексадекан и на хексадекан в контакт с вода при междуфазова граница, стабилизирана с дълговерижно повърхностно-активно вещество. В съгласие с експериментални литературни данни, при замръзване е установено образуването на междинни, поликристалитни ротаторни фази. Предложени са процедури за структурен анализ на поликристалитни моделни фази, съставени от квазилинейни молекули, с помощта на които е направен структурен анализ на кристалитите от хексадеканови молекули в замръзналите моделни системи. Направено е предположение за най-вероятната последователност, в която протичат междуфазовите преходи при кристализация на хексадекан.

Използваният в дисертационния труд изчислителен протокол преодолява недостатъците на други подходи като позволява на системите да преминават свободно от твърдо към течено състояние при загряване на системата и обратно при охлаждане. Проведените структурни анализи са независими от координатната система и позволяват анализирането на поликристалитни структури. Използваната комбинация от три структурни параметъра разграничава всичките пет възможни ротаторни фази и триклинния кристал.

Най-съществените резултати от изследванията на Стоян Илиев са публикувани в три научни статии, отпечатани в авторитетни международни списания от категория Q1 с висок импакт фактор (*Journal of Colloid and Interface Science*, 2023, IF: 9.9 (забелязани са вече 6 цитирания), *Molecules* 2023, IF: 4.6 и *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 2024, IF: 5.2). Резултати от изследванията са представени на 7 научни форума в страната и чужбина.

Заключение. Моделните теоретични изчисления, представени в дисертационния труд на Стоян Илианов Илиев, са проведени на високо теоретично ниво, коректно и изчерпателно. Те са безспорен принос към изследването на фазовите преходи на граница вода-алкан и изясняването на ролята на повърхностно активните вещества и кривината. Резултатите са описани по убедителен начин, с точна терминология, дискутирани са аргументирано и с разбиране, което е неоспоримо доказателство за задълбочените познания и отличната теоретична подготовка на Стоян Илиев, допринесли за успешното изпълнение на изследванията в тази авангардна за съвременната наука област.

Анализът на докторската дисертация, научните публикации и получените резултати ми дават основание, без колебание да дам своята положителна оценка като гласувам с „да“ за присъждането на ОПС „доктор“ на **Стоян Илианов Илиев** по ПП 4.2. Химически науки (Теоретична химия – Изчислителна химия).

Ноември, 2024 г.

София

Наташа Трендафилова