

СТАНОВИЩЕ

от проф. д.н. Пламен Николов Пенчев
кат. "Аналитична химия и компютърна химия" - Химическия факултет,
Пловдивски университет "Паисий Хилендарски"

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен '**доктор**'
в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика,
професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма „Аналитична химия“

Автор: *Слава Христова Цонева*

Тема: *Компютърна интерпретация на вибрационни спектри*

Научен ръководител: *проф. д.н. Пламен Николов Пенчев, кат. "Аналитична химия и компютърна химия" - Химическия факултет, Пловдивски университет "Паисий Хилендарски"*

1. Общо представяне на процедурата и докторанта

Със заповед № Р33-4997 от 19. 10. 2017 г. на Ректора на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски" съм определен за член на научното жури в качеството си на ръководител на докторанта.

Представеният от докторант Цонева комплект материали на електронен носител е в пълно съответствие с изискванията на ЗРАС в РБ и правилника за неговото прилагане, както и правилника за РАС на ПУ „Паисий Хилендарски".

Докторант Слава Цонева е наш възпитаник (бакалавърска и магистърска степен) и вече трета година работи в кат. "Аналитична химия и компютърна химия" като асистент и моите наблюдения са, че тя се справя много добре с преподавателската си дейност. Като неин ръководител ще отбележа, че тя работи много активно и успешно по темата на нейната дисертация.

2. Актуалност на тематиката

Въпреки многобройните публикации от други автори по темата на дисертацията редица проблеми остават нерешени, основно при качествения анализ на смеси с помощта на инфрачервени (ИЧ) и Раман спектри. Като се има предвид, че анализът на спектрите на смеси от органични съединения има редица предимства (формулирани и описани в дисертацията) пред рутинния анализ с хроматографски техники, това направление в дисертационния труд е изключително актуално. Другата главна тема в дисертационния труд е разкриването на редица закономерности на връзката между подобие на ИЧ и Раман спектри на органични съединения, от една страна, и структурното подобие на съединенията, от друга страна. Тази

тема е частично изследвана от други автори за спектрално подобие на ИЧ спектри, които са сравнявани по цяла спектрална крива, но не и по ивици (пикове) както това е докладвано в дисертационния труд на Слава Цонева. Изследвания от този род са актуални поради тяхната връзка с *търсенето по подобие* в спектрални библиотеки, особено за бързо навлизащите в аналитичната практика Раман спектри.

3. Познаване на проблема

Литературния обзор е изчерпателен и значителен по обем. Моите лични наблюдения като ръководител са, че докторант Цонева е запозната с всички цитирани източници, някои от които многократно са обсъждани в хода на нашата съвместна работа. Математическия апарат на тези две основни теми в дисертацията беше включен в конспекта за изпита „Докторантски минимум“ на Слава Цонева, който изпит тя положи с оценка Много добър 5.

4. Методика на изследването

Методиката на изследване в дисертацията следва тази, описана в сродните публикации от другите автори по тази тематика. За анализ на смеси настоящите изследвания са извършени с моделни смеси, т.е. такива приготвени в нашата лаборатория, като трябва да се спомене, че смесите са изключително разнообразни и техният брой надминава броя на смесите, които са използвани от други автори в техните публикации. Също така е акцентувано върху анализа на смеси от изключително подобни по структура съединения, което създава трудности при прилагане на известните рутинни методики за анализ на смеси. При изследване на връзката между структурното и спектралното подобие е използвана методика, описана от проф. Вармуца и съавтори - в част от изследванията тя е приложена буквално с цел сравнение на нашите резултати и другите автори, но в дисертацията има редица новости както при оценка на получените резултати, така и в избора на обекти (в случая Раман спектри и търсене по пикове, за които няма докладвани в литературата резултати).

5. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Приносите на изследванията са коректно описани от докторант Слава Цонева в съответния раздел на дисертацията, а обобщението на резултатите е сполучливо и систематично. Тези приноси са реални и имат своето практично значение за целите на вибрационната спектроскопия. Допълнителни приноси са обогатяване на спектралните библиотеки със ИЧ, Раман и ATR спектри измерени от самата Слава Цонева, която дейност е значително трудоемка и изисква намесата на изграден специалист (химик и спектроскопист, едновременно). В хода на написване на дисертационния труд имах редица забележки по научния стил на докторанта, които бяха отразени от нея, но все пак имам редица критични забележки по стила на изказ и формулировка на редица твърдения в дисертацията, които при поредното прочитане на дисертационния труд изглеждат не дотолкова ясни и трудни за разбиране.

6. Преценка на публикациите и личния принос на докторанта

Две от публикациите са в списание с импакт фактор и три в български списания без импакт фактор. Като съавтор и ръководител се въздържа да давам преценка на тези публикации, но уверено твърдя, че участието на докторант Слава Цонева бе във всички етапи по изготвяне на публикациите – дискусия на планираните изследвания, химичните манипулации с пробите, измерване на спектрите, математическа обработка на резултатите и дискусия по текста на публикациите. Част от изследванията са представени като постери на конференции с активното участие на докторанта.

7. Автореферат

Авторефератът е изготвен много добре и напълно отразява проведените изследвания.

8. Препоръки за бъдещо използване на дисертационните приноси и резултати

Много на брой препоръки са директно предадени на докторанта, но основната е тя да работи за подобряване на своя писмен стил.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд *съдържа научни, научно-приложни и приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката* и отговарят на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и съответния Правилник на ПУ „Паисий Хилендарски“. Представените материали и дисертационни резултати **напълно** съответстват на специфичните изисквания на Химическия факултет, приети във връзка с Правилника на ПУ за приложение на ЗРАСРБ.

Дисертационният труд показва, че докторант Слава Христова Цонева **притежава** задълбочени теоретични знания и професионални умения.

Поради гореизложеното, убедено давам своята **положителна оценка** за проведеното изследване, представено със статии, дисертационен труд, автореферат, обобщение на постигнатите резултати и приноси, и **предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен ‘доктор’** на Слава Христова Цонева в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма „Аналитична химия“.

18. 12. 2017 г.

Изготвил становището:

проф. д.н. Пламен Николов Пенчев