

## СТАНОВИЩЕ

от д-р Марин Иларионов Рогожеров, доцент в ИОХЦФ-БАН

относно дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен 'доктор' в област на висшето образование " Природни науки, математика и информатика", професионално направление " Химически науки (Аналитична химия)" докторска програма „Аналитична химия“.

**Автор:** Слава Христова Цонева.

**Тема:** "Компютърна интерпретация на вибрационни спектри"

**Научен ръководител:** проф.дхн. Пламен Пенчев, ПУ „ Паисий Хилендарски“, гр. Пловдив.

Авторът е предоставил комплект от материали на хартиен и електронен носител, както и необходимите документи в съответствие с чл.36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ.

Дисертантката е включила общо 5 публикации в дисертационния труд, от които 2 са публикувани в списания с импакт фактор, а останалите 3 - в български списания без импакт фактор.

От биографичните данни е видно, че дисертантката е придобила бакалавърска и магистърска степен в ПУ "Паисий Хилендарски", гр. Пловдив и е работила съвместно с проф. Пламен Пенчев, проф. Георги Андреев и други учени в областта на компютърната химия. Контактът с тези изследователи несъмнено е повлиял благоприятно върху разработването на разглеждания дисертационен труд.

Темата на настоящата дисертация третира въпроса за разпознаването и търсенето на неизвестна химическа структура на органично съединение с помощта на компютърна интерпретация на вибрационни (ИЧ- и/или Раманови) спектри. Дисертантката удачно се е насочила към вибрационните спектрални методи, тъй като те са най-често използвани за получаване на евтина и надеждна спектрална информация относно функционалните групи, изграждащи органичните съединения.

С развитието на компютърната техника стана възможно бързо и надеждно да се съхраняват и обработват огромно количество данни, получени при използването на съвременната спектрална апаратура. Този факт дава реална възможност за създаването на големи библиотеки от спектрални данни, с помощта на които, както и на различни евристични алгоритми за библиотечно търсене, може да се получи необходимата информация за определена химическа структура. В резултат се постига бързата идентификация на разнообразни органични съединения, използвани в различни области на съвременния живот.

Целите на настоящата дисертация са свързани с подобряване на някои от методите за търсене в библиотеки от вибрационни спектри, от една страна, а от друга, с изследване на зависимостта между структурно и спектрално подобие. Във връзка с поставените цели, авторката на дисертационния труд е формулирала релевантно серия от задачи, а именно:

- Създаване на библиотека от ATR спектри;
- Допълване на библиотеката от Раман спектри с нови спектри;
- Оптимизиране на толерансите при търсене по ивици на ИЧ/Раман спектри за идентификация;
- Проверка на библиотечното търсене на ATR спектри в библиотеки от ИЧ спектри на поглъщане, както и търсене в обратния ред;
- Изследване на зависимостта между структурно и спектрално подобие за ИЧ/Раман спектри при метод на търсене по пикове;
- Сравнение на зависимостта между структурно и спектрално подобие за ИЧ и Раман спектри;
- Създаване на нова методика за анализ на ИЧ и Раман спектри на смеси.

Направеният изчерпателен литературен обзор в началото на дисертацията свидетелства за доброто познаване на тематиката и състоянието ѝ. Представени са възможностите и проблемите на вече използвани алгоритми за библиотечно търсене в ИЧ и Раман спектрални библиотеки.

В дисертационния труд са използвани главно две методики: търсене по пикове и търсене по спектрална крива в ИЧ -и Раман библиотеки. Създадена е също нова методика за анализ на ИЧ и Раман спектри на бинерни смеси при работа с многопроменлива линейна регресия и с алгоритъм за изваждане с три вида коефициенти. За реализирането на някои от тези методики са използвани програмни продукти IRSS и други, както и класификационни алгоритми за спектрално и структурно подобие в ИЧ-, Раман и комбинирани спектрални библиотеки.

Дисертационният труд обхваща 170 страници, като включва кратко въведение, изчерпателен литературен обзор, подробен коментар на използваните спектрални библиотеки, софтуер и алгоритми за библиотечно търсене и за сравнението им, както и подробен коментар на връзката между спектрално и структурно подобие в раздела „Резултати и дискусия“.

Приносите на настоящия труд могат да бъдат обобщени по следния начин:

- Създаване на нова ATR и допълване на стара Раман спектрални библиотеки, както и използване на нова методика, базирана на линейна регресия и алгоритъм за изваждане с три вида коефициенти, а също и на други евристики;

- Експериментална проверка на алгоритмите за търсене по ивици в ИЧ и Раман библиотеки с цел идентификация на непознато съединение, която показва, че най-добри резултати се получават при работата с правия алгоритъм;
- Изследване на зависимостта между структурно и спектрално подобие за ИЧ спектри с метода на търсене по пикове, което показва, че скаларното произведение по пикове дава по-висока оценка на структурното подобие от симетричната мярка, докато за Раман спектрите е обратно;
- Създаване на нова методика за анализ на ИЧ и Раман спектри на бинарни смеси при работа с многопроменлива линейна регресия и алгоритъм за изваждане с три вида коефициенти.

Трябва да посоча като известна слабост на дисертационния труд, че използваните базисни понятия за спектрално и структурно подобие са твърде икономично представени в увода чрез изреждане на използваните мерки на подобие. Тези понятия се дискутират подробно на стр.71-76 във връзка с използването на различни алгоритми за библиотечно търсене.

В повечето статии, публикувани в международни списания с импакт фактор, както и в български списания, дисертантката е първи автор, а в останалите е втори автор. Това дава определено основание включените работи да се разглеждат като личен принос на авторката.

Авторефератът добре представя структурата, целите и резултатите на дисертационния труд. На определени места обаче изказът е неясен; така например, на стр. 7 в раздела “3.4. *Използвани алгоритми за спектрално и структурно подобие в ИЧ и Раман спектрални библиотеки*” четем: „В част от нашите изследвания сме проучвали преносимостта на използваната от идея Varmuza и сътр. [12] за разкриването на връзките между спектралното и структурното подобие, но при работа с метода за търсене по пикове, съдържащи данни за интензитет и вълново число на спектралните ивици.“)

Препоръката ми към дисертантката е основно в приложен аспект, а именно да се разширят и използват вече наличните ИЧ и Раман спектрални библиотеки с цел идентификация и анализ на български природни продукти.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Дисертационният труд съдържа научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и изследването отговаря 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 и на специфичните изисквания на Факултета по Химия.

Дисертационният труд показва, че дисертантката магистър Слава Христова Цонева притежава задълбочени теоретични знания и професионални умения по научната специалност „Аналитична химия и компютърна химия“ и демонстрира качества и умения за провеждане на изследвания с получаване на оригинални научни приноси. Въпреки наличието на някои по-горе коментирани известни слабости в дисертационния труд и автореферата, убедено давам своята положителна оценка на проведеното изследване, постигнатите резултати и приносите, и предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен “доктор“ на Слава Цонева в област на висше образование: 4. „Природни науки, математика и информатика“; с професионално направление: 4.2. „Химически науки (Аналитична химия)“ .

15.12.2017 г.

Изготвил становището: .....

доц. д-р Марин Рогожеров,