

## РЕЦЕНЗИЯ

от професор доктор на науките **Иван Петков БАНГОВ**,

на дисертационен труд за присъждане на научна степен

**'доктор'**

в областта на висшето образование 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление 4.2. Химични науки, научна специалност "Аналитична химия".

**Автор:** асистент **СЛАВА ХРИСТОВА ЦОНЕВА**, катедра "Аналитична и компютърна химия", Пловдивски университет "Паисий Хилендарски".

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

### 1. Предмет на рецензиране

Със заповед № **Р33-3747** от **21.07.2017г.** на Ректора на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“ (ПУ) съм определен за член на научното жури за осигуряване на процедура за защита на дисертационен труд на тема *"Компютърна интерпретация на вибрационни спектри"*, за придобиване на научна и образователна степен **'доктор'** на ПУ в областта на висшето образование 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление 4.2. Химични науки, научна специалност "Аналитична химия".

Автор на дисертационния труд е асистент **СЛАВА ХРИСТОВА ЦОНЕВА**, Катедра Аналитична химия и компютърна химия, към Факултета по химия на Пловдивския университет "Паисий Хилендарски".

Представеният от Слава Христова Цонева комплект материали на хартиен носител е в съответствие с Чл.36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ и включва следните документи:

1. молба от Слава Христова Цонева до Ректора на ПУ за разкриване на процедурата за защита на дисертационен труд, с дата 13.10.2017г;
2. автобиография в европейски формат.

3. диплома за образователно - квалификационна степен “магистър”, с приложение оригинал и нотариално заверено копие от нея;
4. протоколи от КС, за готовност на кандидата за предварително обсъждане;
5. заповед на ректора за допълнително разширяване на КС;
6. протокол от предварителното обсъждане в катедрата;
7. автореферат- 1 брой;
8. декларация за оригиналност и достоверност на приложените документи;
9. справка за спазване на специфичните изисквания на съответния факултет; 10. списък на публикациите;
10. дисертационен труд - 1 брой;
11. копия на публикациите по темата на дисертационния труд;
12. заповед за зачисляване в докторантура;
13. заповед за прекъсване и продължаване на обучението;
14. заповед и за комисия и за издържани на изпити по индивидуалния учебен план;
15. заповед за отчисляване от докторантура;
16. протокол за издържани изпити по индивидуалния учебен план;
17. други документи съобразно изискванията на ФС;
18. документ за внесена такса съобразно тарифата;
19. комплект документи на хартиен носител.

Дисертантът е приложил копията на 5 броя публикации.

## **2. Кратки биографични данни**

Според документацията, която ми бе предоставена, Слава Христова Цонева има 2 завършени образования със степен бакалавър: в УНСС, гр. София, с основен предмет “Икономика и организация на труда” (01.10.2001– 31.10.2005г.) и в ПУ “Паисий Хилендарски“, гр. Пловдив “Компютърна химия”(01.10.2007 – 30.09.2011г.), както и 2 завършени магистратури: една по междуакадемична програма на БАН и ВТУ „Св. Св. Кирил и Методий“, гр. София, с тематика “Финанси на предприятието” (09.2006 – 11.2007г.) и другата “Спектрохимичен анализ” в ПУ “Паисий Хилендарски“, гр. Пловдив (10.2012г. – 07.2013г.).

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

Вибрационната спектроскопия е важен метод при анализа на химическите съединения. Традиционно тя се извършва от специалист-спектроскопист. Обаче, необходимостта от оценка на големи колекции химични съединения, организирани в бази от данни, прави този процес изключително неефективен. Затова с разработката на компютърните

технологии от средата на 20-ти век до сега се разработват така наречените програми за изясняване на химичната структура с помощта на компютър (*computer aided structure elucidation*). Това, разбира се изисква разработката на нови методи, които свързват химията, спектроскопията с математиката (математичната химия) и информатиката. Очевидно е, че разработката на такива нови оригинални методи има както фундаментален, така и приложен характер. Предложената ми за рецензия дисертация има точно такъв модерен характер, покриваща най-новите тенденции в модерната наука.

#### **4. Познаване на проблема**

Разработката на общата част и литературния разбор ми направиха много добро впечатление. Там са обхванати почти всички по-важни разработки, от световно известни учени, на този проблем. Разгледани са техните подходи към решаването на така наречената обратна задача, т.е., от спектралната информация да определите структурата. Тук трябва да отбележим, че при обратната задача имаме недостиг на информация, което важи много повече за вибрационните спектри, отколкото да речем при ЯМР спектрите. От тази част се вижда, че кандидатката има добро познаване на проблемите, с които тя трябва да се справи в своята докторанска работа. Дисертацията е 170 страници, като литературният обзор се състои от 63 страници. Библиографската справка съдържа 247 референции.

#### **5. Методика на изследването**

Кандидатката за степен доктор е формулирала по следния начин целта на работата и по дисертацията:

*подобряване на някои от методите за търсене в библиотеки от вибрационни спектри, както и изследване на зависимостта между структурно и спектрално подобие за тези спектри*

Задачите, които тя трябва да реши, тя формулира по следния начин:

- Създаване на библиотека от АТР спектри;
- Допълване на библиотеката от Раман спектри с около 70 нови спектъра;
- Оптимизиране на толерансите при търсене по ивици на ИЧ/Раман спектри за идентификация;
- Проверка на библиотечното търсене на АТР 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.

Тук искам да отбележа, че IR спектрите са много по-трудни за разпознаване, понеже някои от ивиците са твърде широки, най-вече тези на най-вече тези на С-Н атоми.

## **6. Характеристика и оценка на дисертационния труд**

За мене това е една доста амбициозна програма. За анализите са използвани 4 библиотеки. 2 с IR спектри 1 с Раман спектри и 1 с ATR спектри. Моят въпрос тук е защо 2-те библиотеки с IR спектри не са обединени в една библиотека. Доколкото виждам разликите са само в апаратите. Използвани са 5 софтуерни продукта, като най-важният от тях е програма за търсене в библиотеки от вибрационни спектри IRSS. Основните методи за търсене в базите от данни е търсенето на структурно подобие с различни мерки за подобие. Интерес представляват резултатите на сравнение на давата типа спектри, IR и ATR. Доколко тези техни разлики влияят на резултатите. Направено е изследване на връзката между структурното и спектралното подобие в библиотеки от ИЧ и Раман спектри. Изследвана е и връзката между спектрално и структурно подобие.

## **7. Приноси и значимост на разработката за науката и практиката**

В представения ми за рецензия дисертационен труд са извършени изследвания върху възможностите на различни алгоритми на подобие, които се използват за търсене в базата от данни на различни типове вибрационни спектри - IR, Raman, ATR. В това се заключава основния принос на тази дисертация. Създадена е библиотека от 107 ATR спектри и са допълнени базите от IR и Raman спектри. Интерес представлява оригиналната търсеща програма IRSS, разработена от проф. Пенчев. Тук е направена проверка на алгоритмите по метода на търсене по ивици и по пикове с цел идентификацията на непознато вещество при промяна на толерансите по вълново число ( $\Delta\nu$ ) и сигнал ( $\Delta A/\Delta I$ ) и намиране на техните оптимални стойности. Изследвана е връзката между спектралното и структурно подобие при IR, Raman и ATR спектри. Интересен резултат е, че при изследване на зависимостта между структурно и спектрално подобие за ИЧ спектри с метода на търсене по пикове се установява, че скаларното произведение по пикове (SpSim2) дава по-висока оценка на структурното подобие от симетричната мярка (SpSim1), докато за Раман спектрите е обратно. Също интересен резултат е, че при сравняването на резултатите от търсене по пикове с търсене по спектрална крива показват, че във втория случай резултатите са по-добри, където

най-високо структурно подобие се получава при библиотечно търсене с коефициент на корелация, макар и да не съвпада с най-доброто структурно подобие в библиотеката. Тук би било нужно да се дадат теоретични обяснения на тези резултати. Поради ограниченото място на рецензията, аз съм отбелязал само някои от постиженията, които съм намерил за много положителни.

## **8. Преценка на публикациите по дисертационния труд.**

Дисертантката е представила 5 публикации, от които 2 са в списание с импакт фактор (Bulgarian Chemical Communications) и 3 в списание без импакт фактор. А мисля, че тази продукция е напълно достатъчна за степента доктор. От друга страна, в дисертацията има много материал за една публикация в чуждо списание с по-висок импакт фактор.

## **9. Лично участие на автора**

Моето мнение е, че дисертантката е взела активно участие в разработката на този дисертационен труд.

## **10. Автореферат**

Авторефератът се състои от 39 страници и отразява в съкратен вид най-важните аспекти на дисертацията.

## **11. Критични забележки и препоръки**

Моето мнение е, че тези разработки могат да продължат с включването на нови подходи в библиотечното търсене. Аз говорил с ръководителя на дисертантката за използване на метода на дескрипторни и размити (fuzzy) дескрипторни фингърпринти, които аз разработвам, за както за клъстериране, така и за подобие (използване на индекса на Танимото) на спектрална и структурна информация. Разбира се това може да бъде обект на една нова дисертация.

## **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 Факултета по Химия, приети във връзка с Правилника на ПУ за приложение на ЗРАСРБ.

Дисертационният труд показва, че дисертантът Слава Христова Цонева напълно притежава задълбочени теоретични знания и професионални умения по научна специалност Хемоинформатика и компютърна химия, като демонстрира качества и умения за провеждане на изследвания с получаване на оригинални и значими научни приноси.

Поради гореизложеното, убедено давам своята *положителна оценка* за проведеното изследване, представено от рецензираните по-горе дисертационен труд, автореферат, постигнати резултати и приноси, и ***предлагам на почитаемото научно жури да присъди научната и образователна степен ‘доктор’*** на Слава Христова Цонева в областта на висшето образование: Природни науки, математика и информатика; професионално направление 4.2. Химични науки, научна специалност “Аналитична химия”.

Рецензент:

Професор доктор на науките Иван Бангов