

## СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Николай Георгиев Василев

Център по ЯМР спектроскопия,

Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия, БАН

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:** *Стефка Руменова Начкова*

**Тема:** *„Компютърни методи за интерпретация на  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектри на природни съединения“*

**Научен ръководител:** *проф. д.н. Пламен Николов Пенчев - Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“*

### 1. Общо представяне на процедурата и докторанта

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

Кандидатката е включила общо 2 публикации в дисертационния труд, от които 1 е публикувана в специализирано международно списание с импакт фактор, а другата в българско списание без импакт фактор. Резултатите от дисертационния труд са докладвани и на 3 научни форума.

### 2. Актуалност на тематиката

Безспорна е актуалността на дисертацията. Директното установяване на структурата на изследвано с ЯМР спектроскопия съединение (от разтвор до структура без човешка намеса) е актуална тематика по която се работи отдавна и бе поставена като един от приоритетите в развитието на органичната химия на това десетилетие. Поставените и изпълнени задачи в дисертационния труд са стъпка в постигането на тази цел.

### 3. Познаване на проблема

Разработката на общата част и литературния разбор ми направиха много добро впечатление. В литературния обзор са систематично и критично представени всички по-важни научни разработки по решаването както на правата, така и на обратната задача при отнасянето на ЯМР спектри. Разгледани са основните проблеми и подходи за оп-

ределяне на структурата от ЯМР спектралната информация (тъй наречената обратна задача). Кандидатката демонстрира много-добро познаване на проблемите, с които тя трябва да се справи в своята научна работа. Дисертационния труд е написан на 156 страници, като литературният обзор обхваща 44 страници. Литературната справка съдържа 194 цитата, от които 178 се отнасят за литературния обзор.

#### **4. Методика на изследването**

Кандидатката е формулирала по следния начин целта на работата и по дисертацията: Изследване приложението на интерпретационното библиотечно търсене за разкриване структурата на природни съединения по техните  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектри. Поставените задачи са адекватни за изпълнение на целта на дисертацията. Избраната методика, основно разработена от ръководителя на докторантката, позволява постигането на поставената цел и получаване на адекватен отговор на поставените задачи. Систематично следват задачите една след друга: съставяне на подходяща библиотека от  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектри; оценка на известен алгоритъм за интерпретационно библиотечно търсене и на неговата функция на надеждност; проверка на преносимостта на тази функция към други библиотеки; създаване на нова функция на надеждност за оценка на резултатите от библиотечното търсене в създадената библиотека и т.н. За съжаление изследванията са все още са на етап тестване на подходи и критерии с тестови спектри и не е достигнат етап на анализ на спектри на нови неизвестни съединения.

#### **5. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите**

Дисертационният труд е структуриран по следния начин: Въведение, Литературен обзор, Цели и задачи, Метод, Спектрални библиотеки, Резултати и дискусия, Обобщени резултати и изводи, Приноси. В глава Въведение се доказва актуалността и се дефинират основните термини на дисертационния труд. След обстоен литературен преглед на методите за интерпретация на ЯМР спектри, на генерация на структури и на предсказване на ЯМР спектри логично се формулират целите и задачите на дисертационния труд. Следва представяне на избрания метод на интерпретационно библиотечно търсене, използвания софтуер и спектрални библиотеки. След подробно и онагледено с достатъчно фигури и таблици представяне на резултатите от научните изследвания, те са обобщени коректно и систематично от докторант Начкова. Приносите от изследванията имат както научен, така и научно приложен характер. Тези приноси по същество са обогатяване на научните знания с подобрени подходи на информационно търсене в спектрални библиотеки с ЯМР спектри и с подобрена оценка на резултатите от тези търсения. В хода на прочитането на дисертационния труд и на автореферата се забелязват някои технически грешки, които не намаляват стойността на дисертационния труд.

## **6. Преценка на публикациите и личния принос на докторанта**

Както беше споменато по-горе дисертационният труд включва общо 2 публикации: 1 е публикувана в специализирано международно списание Chemistry of Natural Compounds с импакт фактор 0.460 за 2016 г., а другата в българско списание без импакт фактор. Резултатите от дисертационния труд са докладвани и на 3 научни форума.

Оценката ми за личното участие на докторантката в проведеното дисертационно изследване се базира само върху съдържанието на дисертацията. Начинът по който е написано въведението и литературния обзор на дисертационния труд показва, че тя е запозната много добре с наличната литература, което и е помогнало да планира ясно и точно научните търсения и да избере методики и подходи, позволяващи реализиране на целите на дисертационния труд. Прочита на дисертацията ме убеждава в задълбоченото познаване на разработваните проблеми.

Критични забележки са свързани основно с наличието на някои технически грешки (редакционни пропуски), които в никакъв случай не намаляват приноса на дисертацията. Липсва превод на български или обяснение на някои съкращения в дисертационния труд: напр. NOE – Ядрен ефект на Оверхаузер и т.н. Имам и един въпрос по съдържанието на Фиг. 6. На какво се дължат големите отклонения (над 50 м.ч.) между някои експериментални и предсказани химични отмествания?

## **7. Автореферат**

Авторефератът е оформен съгласно общоприетите изисквания и отразява точно основните научни приноси на дисертационния труд.

## **8. Препоръки за бъдещо използване на дисертационните приноси и резултати**

Резултатите от дисертационния труд са обещаващи и препоръчвам тестване на разработените процедури върху реални спектри на неизвестни съединения, като по този начин се демонстрира научно-приложния характер на тези изследвания.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Дисертационният труд съдържа научни и 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“.

Дисертационният труд показва, че докторант Стефка Начкова 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 незначителни бележки по 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 Стефка Руменова Начкова в област на висше образование: 4. „Природни науки, математика и информатика“; с професионално направление: 4.2.„Химически науки (Аналитична химия)“ .

24.04.2018 г.

**Изготвил становището:** .....

проф. д-р Николай Георгиев Василев