

## СТАНОВИЩЕ

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

за 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, кат. "Аналитична химия и компютърна химия" - Химическия факултет, Пловдивски университет "Паисий Хилендарски"*

### 1. Общо представяне на процедурата и докторанта

Със заповед на Ректора на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“ съм определен за член на научното жури в качеството си на ръководител на докторанта.

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

Докторант Стефка Начкова е наш възпитаник (бакалавърска и магистърска степен), работила е три години в кат. "Аналитична химия и компютърна химия" като асистент преди редовната докторантура и моите наблюдения са, че тя се справяше много добре с преподавателската си дейност и научната работа, която провеждахме по това време. Като неин ръководител ще отбележа, че тя работи много активно по темата на нейната дисертация. Тя самостоятелно усвои програмната система „R“ и извърши всички изчисления, включени в дисертацията, напълно самостоятелно. Тя се включваше много активно и в подобна по характер работа, засягаща компютърните методи, с други членове на групата по Молекулярна спектроскопия и в резултат на това има още две публикации с импакт фактор, които са извън нейната дисертация.

### 2. Актуалност на тематиката

$^{13}\text{C}$  ЯМР спектрите на природни съединения съдържат изключителен обем от информация за структурата на органичните съединения, която информация засяга основно вида на скелета на съединението, както и заместителите, свързани към него. Както се вижда от

обстойния литературен обзор в дисертацията компютърната интерпретация на този вид спектри е незаменима и е в помощ на изследователя, най-вече поради многобройните числови данни в тях, обработвани със спектро-структурни корелации. Образно казано: и най-малката информация, която може да се извлече от спектрите спомага изключително много за разкриването на структурата на непознатото природно съединение.

### **3. Познаване на проблема**

Литературния обзор е изчерпателен и значителен по обем. Моите лични наблюдения като ръководител са, че докторант Начкова е запозната с всички цитирани източници, някои от които многократно са обсъждани в хода на нашата съвместна работа. Математическия апарат на използваните методи беше включен в конспекта за изпита „Докторантски минимум“ на Стефка Начкова, който изпит тя положи с оценка Отличен 6.

### **4. Методика на изследването**

Методиката на изследване в дисертацията следва тази, описана в сродните публикации от другите автори по тази тематика. Интерпретационното търсене е сравнително нов алгоритъм и недостатъчно изследван в литературата. Единствената съвременна публикация по темата борави със значителна по обем спектрална извадка и получените резултати за надеждност на генерираните подструктури са непреносими към други спектрални библиотеки, които са в процес на интензивно създаване от научната общност. Този проблем бе решен от докторанта и тя предложи бързо и ефективно създаване на функция на надеждност за нова спектрална библиотека. Редица от резултатите в дисертацията са получени със спектрална библиотека от 1000 спектъра, създадена с активното участие на докторант Начкова и това налага извличане на функция на надеждност при работа с тази библиотека.

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

Приносите на изследванията са коректно описани от докторант Стефка Начкова 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 интерпретацията на  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектри на природни съединения. Допълнителен научно-приложен принос е създаването на спектрална библиотека от 1 000 напълно отнесени  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектри на природни съединения по данни от научни списания.

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

Една от публикациите е в списание с импакт фактор и една в българско списание без импакт фактор, което напълно покрива специфичните изисквания на Химическия факултет на ПУ „П. Хилендарски“. Като съавтор и ръководител се въздържа да давам преценка на тези публикации, но уверено твърдя, че участието на докторант Стефка Начкова бе във всички етапи по изготвяне на публикациите – дискусия на планираните изследвания, математическа обработка на резултатите и дискусия по текста на публикациите. Тук трябва да спомена, че докторант Начкова бе изключително критична към резултатите от прилагане на метода и

предложи допълнителни сравнения с цел избягване на получаването на частни резултати (артефакти, както е наименованието в научната литература). Част от изследванията са представени като постери на конференции в България.

### **7. Автореферат**

Авторефератът е изготвен много добре и напълно отразява проведените изследвания.

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

Понастоящем докторант Стефка Начкова работи в лаборатория на държавна агенция „Митници“ по специалността си и моята основна препоръка е да продължи своята научна и преподавателска кариера в нашия факултет.

## **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 Стефка Руменова Начкова **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 Стефка Руменова Начкова в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма „Аналитична химия“.

3. 5. 2018 г.

**Изготвил становището:** .....

проф. д.н. Пламен Николов Пенчев