

СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Илиян Иванов Иванов
катедра „Органична химия“, ПУ „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
научна специалност: Органична химия

Автор: Светлана Любенова Аврамова

Тема: *Компютърно моделиране на химични реакции*

Научни ръководители: доц. д-р Николай Кочев

доц. д-р Пламен Ангелов

Със заповед № РЗЗ-1769/25.04.2018 г. на Ректора на ПУ П. Хилендарски съм определен за член на научно жури и с решение на научното жури (протокол №1/27.04.2018 г.) да изготвя становище по процедура за защита на дисертационен труд на тема *Компютърно моделиране на химични реакции* за придобиване 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 Органична химия. Автор на дисертационния труд е Светлана Аврамова - докторант в задочна форма на обучение към кат. Органична химия, Химически факултет.

Представеният от докт. Аврамова комплект материали на електронен носител е в пълно съответствие с изискванията на ЗРАС в РБ и правилника за неговото приложение, както и правилника за развитие на академичния състав на ПУ „Паисий Хилендарски“ и свързаните с него специфични изисквания на Химическия факултет.

Със заповед на Ректора на ПУ № РЗЗ-697/21.02.2013 г. Св. Аврамова е зачислена като докторант– задочна форма на обучение по научна специалност „Органична химия“ към кат. Органична химия. След изпълнение на индивидуалния план за обучение и изтичане срока на докторантурата, Св. Аврамова е отчислена в срок с право на защита със заповед № РЗЗ-1535/21.04.2017 г.

През периода на докторантурата и към настоящия момент, докт. Аврамова последователно заема длъжността експерт, старши експерт и главен експерт в Агенция „Митници“, Митница Пловдив отдел „Митническа лаборатория“.

За периода на своето обучение докт. Аврамова е изпълнила в пълен обем образователната част от своя индивидуалния план. Положила е успешно изпит по специалността с оценка Мн. добър 5.00.

Дисертационният труд е изложен на 287 стандартни страници и включва 14 таблици и 129 фигури схеми. Библиографията обхваща 310 литературни и информационни източника. Структуриран е по познатия класически начин – въведение; литературен преглед; цел и задачи; собствени изследвания; тестови резултати и дискусия; заключения; допълнителни материали; библиография и информационни източници.

Темата на представения дисертационен труд е определено в актуална област на съвременната химична наука. Кратко, но ясно е обосновано практическото приложение на компютърното моделиране на химични реакции за съхраняване на информация за химични реакции, извличане на информация и знания за химични реакции, сравняване и анализ на набор от реакции, разработване на модели за реактивоспособност, предсказване на хода на химичните реакции, разработване на модели за синтезен дизайн и пр.

Представения от автора обстоен литературен обзор по тематиката демонстрира отлична информираност, аналитично и задълбочено вникване в проблема. Освен със своята обхватност (310 източника) той прави впечатление и с актуалност – 39 от цитираните източници са от 2018 г.

Целта на дисертационния труд е ясно формулирана и аргументирана. Решаването на поставените единадесет конкретни задачи във връзка с поставената цел са позволили реализирането и в пълен обем. Получените в хода на работата върху дисертацията резултати са обобщени в седем основни извода. Приносите могат да бъдат определени като:

научни – създадени са три бази с данни с химични реакции, експертна система за ретросинтезен анализ, модел за теоретична оценка на синтетичната достъпност на органични съединения;

научно – приложни – създаден е софтуерен модул *Ambit-SMIRKS* с отворен код с приложение в проекти, изискващи обработка на структурна и химична информация, свързана с химични реакции; софтуерни инструменти като конзолни

приложения (*command line tools - cli*) и приложения с графичен интерфейс (*GUI*), които са достъпни на публичните хранилища *sourceforge.net* и *github.com*.

Основните резултати получени при работата по дисертацията са популяризирани сред научната общност чрез четири научни съобщения - една публикация в списание с IF – *Organic Chemistry: An Indian Journal*, 2018 (IF 0.36), две публикации в специализирани списания – *Data*, 2018; *Journal of Cheminformatics*, 2018 и една в *Sci. Work. Union Sci. Bulg. – Plovdiv*, 2017.

Резултатите от проведените изследвания са представени чрез постерни участия на шест научни форума в страната (4) и чужбина (2) – Германия и Холандия.

Авторефератът адекватно и изчерпателно отразява съдържанието на дисертационния труд и приносите направени в него.

В заключение считам, че кандидатът притежава задълбочени теоретични знания в областта и способност за самостоятелни научни изследвания. Дисертационния труд на докт. Аврамова съдържа теоретични и научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката, отговаря на изискванията за присъждане на образователната и научна степен “доктор” съгласно ЗРАС в РБ и напълно покрива критериите залегнали в ПРАС на ПУ „П. Хилендарски“ и специфичните изисквания на ХФ. В съответствие с гореизложеното и във връзка с чл. 10. ал.1 от ЗРАСРБ предлагам **положителна оценка** на дисертационния труд.

Пловдив

5 юни 2018 г.

Председател на НЖ

проф. д-р Илиян Иванов