

СТАНОВИЩЕ

от д-р Пламен Ангелов Ангелов – доцент в ПУ „Паисий Хилендарски“, член на научно жури, определено със заповед на Ректора на ПУ „Паисий Хилендарски“ № Р33-1769/25.04.2018 г.

относно дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен '**доктор**' в област на висше образование „Природни науки, математика и информатика“, професионално направление 4.2. „Химически науки“, докторска програма „Органична химия“ .

Автор: Светлана Любенова Аврамова, задочен докторант

Тема: Компютърно моделиране на химични реакции

Научни ръководители: Доц. д-р Николай Кочев и доц. д-р Пламен Ангелов

1. Актуалност на тематиката

Представеният ми за оценка дисертационен труд е мултидисциплинарен, с приноси в областта на химичната информатика и органичната химия. Тематиката на изследванията е актуална, предвид все по-сложните проблеми поставяни пред организите синтетици, натрупването на огромни масиви от експериментални данни и обусловената от това необходимост от достъпни софтуерни инструменти, подпомагащи планирането на синтеза и предсказването на възможни химични трансформации.

2. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Дисертационният труд е изложен на 245 страници и е организиран в четири основни части: Литературен преглед (65 стр.); Собствени изследвания (73 стр.); Тестове, резултати и дискусия (53 стр.); и Допълнителни материали (46 стр).

Литературният обзор обхваща 310 източника и дава добра представа за по-ранните научни изследвания в областта. Включени са множество скорошни публикации от авторитетни международни списания, което е допълнително свидетелство за актуалността на тематиката.

Собствените изследвания, тестовете и резултатите са представени изключително подробно и са обсъдени в добър научен стил. Докторантът коректно е обобщил и представил

най-важните научни и научно-приложни приноси от дисертацията си: (1) Създадени са три бази с данни с химични реакции, представени в машинно-четим вид. (2) Създадена е експертна система за ретросинтезен анализ. (3) Реализиран е модел за теоретична оценка на синтетичната достъпност на органични съединения. (4) Създаден е софтуерен модул с отворен код, който поддържа пълния SMIRKS синтаксис, и може да се използва в научни и индустриални проекти, изискващи обработка на структурна и химична информация.

На база разработените в дисертацията методи, алгоритми и стратегии са създадени софтуерни инструменти, публично достъпни на sourceforge.net и github.com

Като съръководител на Светлана Аврамова, искам да подчертая, че резултатите и приносите в тази дисертация са плод преди всичко на нейната упорита самостоятелна работа, както и на експертизата и отдадеността на основния ѝ научен ръководител – доц. д-р Николай Кочев.

3. Публикации по дисертационния труд

Изследванията от дисертационния труд са представени в четири статии, от които три вече са публикувани (една в българско и две в международни списания) и една е в процес на рецензиране.

Резултатите са докладвани на 6 научни форума в България и чужбина.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд **съдържа научни и научно-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 ХФ при ПУ „Паисий Хилендарски“. Представените материали и дисертационни резултати напълно **покриват** специфичните изисквания за придобиване на научната и образователна степен „доктор“ в областта на органичната химия.

Дисертационният труд показва, че докторантът Светлана Аврамова **притежава** теоретични знания и професионални умения по в областите на Химичната информатика и Орга-

ничната химия като **демонстрира** качества и умения за самостоятелно провеждане на научно изследване и изготвяне на научни публикации.

Поради гореизложеното, давам своята **положителна оценка** за проведеното изследване, представено от дисертационния труд и **предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен 'доктор'** на Светлана Любенова Аврамова в област на висше образование: „Природни науки, математика и информатика”, професионално направление 4.2. „Химически науки”.

01.06. 2018 г.

Изготвил становището:

доц. д-р Пламен Ангелов