

## РЕЦЕНЗИЯ

от д-р Людмил Манолов Антонов

професор в Института 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 по Органична химия.

**Автор:** Светлана Любенова Аврамова.

**Тема:** Компютърно моделиране на химични реакции.

**Научени ръководители:** доц. д-р Николай Кочев и доц. д-р Пламен Ангелов

### 1. Общо описание на представените материали

Съгласно заповед Р33-1769/25.04.2018г. на Ректора на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“ съм определен за член на научното жури по процедура за защита упоменатия по-горе дисертационен труд. Авторът на дисертационния труд е задочен докторант към катедра „Органична химия“ на Химическия факултет на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“ (ПУ).

След преглед на представения ми комплект документи мога да потвърдя, че те са в съответствие с Чл.36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ, а именно:

- молба до Ректора на ПУ за разкриване на процедурата за защита на дисертационен труд;
- автобиография в европейски формат;
- копие от диплома за висше образование от ПУ (магистър по Органична химия) с приложение поради което не се изисква нотариална заверка;
- протоколи от катедрени съвети, свързани с докладване на готовност за откриване на процедурата и с предварително обсъждане на дисертационния труд (общо 3 броя документи свързани с готовност на кандидата, разширяване на катедрения съвет на катедра „Органична химия“ и предварително обсъждане в катедрата);
- автореферат (38 стр.);
- декларация за достоверност и оригиналност с оригинален подпис;
- справка за спазване на специфичните изисквания на ХФ на ПУ за образователната и научна степен „доктор“;
- списък на научните публикации, включени в дисертационния труд и копия от тях;
- самият дисертационен труд;
- административни документи свързани с провеждане на докторантурата (зачисляване, положен докторантски минимум, всички представени допълнително);

# PDF Eraser Free

Бележки по документите: Липсват документи, удостоверяващи статута на публикация 3 от списъка с публикации. Въпреки това, специфичните изисквания на ХФ на ПУ за образователната и научна степен „доктор“ са спазени, тъй като са налице 2 научни публикации, едната от които в международно реферирано списание (Data на MDPI).

## **2. Кратки биографични данни за докторанта**

Докторантката Светлана Любенова Аврамова е родена през 1987г. в гр. Дупница. През периода 2006-2011г. е студент в ХФ на ПУ, където се дипломира като бакалавър по Компютърна химия (2010г.) и магистър по Органична химия (2011г.) с отлична оценка. На 31.03.2013г. е зачислена като задочен докторант в ХФ на ПУ по докторантска програма „Органична химия“ с научни ръководители доц. д-р Николай Кочев и доц. д-р Пламен Ангелов с тема на дисертационния труд „Компютърно моделиране на химични реакции“. На 20.04.2018г. представя дисертационния си труд за предварително обсъждане в катедра „Органична химия“.

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

Изчислителните технологии и свързаните с тях алгоритми за анализ на експериментални данни са неотделима част от съвременните научни изследвания и модерната индустрия. От особена важност е прогностичният анализ, т.е. способността на базата на съществуващи факти и с помощта на добре подбрани алгоритми да се предскажат тенденции на развитие. От тази гледна точка тематиката на настоящата дисертация е особено актуална и в двете посоки – научно и научно-приложно. Въпреки, че в моите очи органичният синтез е повече изкуство отколкото наука, прилагането на подходящи изчислителни технологии би могло значително да редуцира съпътстващите материални и нематериални разходи и да доведе до нови синтетични решения. Ето защо компютърното моделиране на химични реакции трябва да бъде и ще бъде неотменна част от бъдещата органична химия, но поне по мое мнение човешкият фактор ще остане доминиращ. С оглед на това целите на дисертационния труд са ясно дефинирани и както се вижда, изпълними. Авторът си е поставил за цел да разработи подход за компютърно моделиране на химични реакции с свързан с планиране на органичен синтез и ретросинтезен анализ, предсказване на метаболити на органични съединения и оценка на синтетичната достъпност. Конкретните задачи са ясно дефинирани и представени в логическа последователност – от детайлно изучаване на литературните данни през концептуален дизайн на модела до проверка върху реални примери и сравнение със съществуващи в литературата сходни решения.

## **4. Познаване на проблема**

От изключително подробния и увлекателно написан литературен обзор оставам с ясното убеждение, че докторантката много добре познава основните достижения в областта, в която работи и свободно използва методологията. Показани са силните и слабите страни на съществуващите подходи и тяхното развитие във времето.

## **5. Методика на изследването**

Методологията на изследването е добре обмислена и адекватна. Едновременно се върви в няколко посоки – развитие на съществуващите алгоритми за предсказване на реакции чрез използване на нотацията SMIRKS, създаване на бази данни и Java базирана софтуерна реализация.

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

Дисертационният труд е много добре структуриран. Общият му обем е 274 стр., цитирани са 310 литературни източника, показани са 129 фигури и 14 таблици. Като отделни глави са включени кратко въведение (1 стр.), литературен преглед (67 стр. с 236 цитирани литературни източници), цел и задачи (2 стр.), описание на собствените изследвания (76 стр.), тестове, резултати и дискусия (48 стр.), заключения (4 стр.) и допълнителни материали (47 стр.). Всяка от главите е добре структурирана, съдържанието е представено по убедителен и достоверен начин и е критично дискутирано.

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

Като особено положителен разглеждам факта, че в представения дисертационен труд ясно се виждат както чисто научни, така и научно-приложни приноси. Научните приноси включват: създаване на три бази с данни с химични реакции (синтезно направление, ретро-синтезно направление, биотрансформации), представени в компютърно-четим вид (SMIRKS); създаване на експертна система за ретросинтезен анализ; и разработка на нов алгоритъм за теоретична оценка на синтетичната достъпност на органични съединения. Като цяло научните приноси могат да бъдат класифицирани като формулиране на нова теория и доказване с нови средства на съществени нови страни в съществуващи научни проблеми и теории. Научно-приложните приноси включват създаване и тестване на софтуерен модул с отворен код и софтуерни приложения. Имайки предвид, че създадения софтуер може да се използва за компютърно моделиране на реакции от академични институции, частни компании и регулаторни агенции, неговата практическа значимост и перспективност е очевидна.

## 8. Преценка на публикациите по дисертационния труд

Дисертационният труд на Светлана Аврамова се базира на три научни публикации, две от които – публикувани и една – приета за печат. Първата публикация от представения списък е публикувана на английски език в национално списание (Научни трудове на Съюза на учените Пловдив), останалите две са публикувани съответно в международно реферирано научно списание със свободен достъп (Data) и в международно научно списание с импакт фактор (Organic Chemistry: An Indian Journal, IF=0.36). Две от публикациите са с трима съавтори, а третата – с четирима.

В автореферата е посочена и четвърта публикация, изпратена за разглеждане в Journal of Cheminformatics, без самата публикация да е представена като част от документацията по защитата. Не са посочени цитати, което е разбираемо с оглед на факта, че публикациите в международните списания са от 2018г.

Качеството на публикациите е достатъчно високо и надхвърля значимостта на списанията, в които са публикувани. Затова, горещо препоръчвам в бъдеще авторите да потърсят адекватна, като значимост, платформа за публикуване на научните си резултати.

## 9. Лично участие на докторанта(ката)

Докторантката е или първи съавтор (в една публикация, Data) или втори съавтор, след научния си ръководител, което отразява същественият принос, който тя има в съвместната научна работа.

## 10. Автореферат

Приложеният автореферат по подходящ начин обобщава съдържанието на дисертационния труд. Съвършено правилно акцентът е поставен върху собствените резултати и свързаната с тях дискусия. В известна степен той може да се използва като ръководство на разработения софтуер от докторантката и нейните научни ръководители софтуер, което е едно добро и практично решение.

## 11. Критични забележки и препоръки

В дисертационния труд имената на химични съединения и на цитирани автори са дадени смесено на български и английски. Би следвало да се избере едното от двете. Налице са и множество английски термини транслирани директно на български без да се потърси адекватно преводно значение. Например „хит“ (hit), което в контекста на дискусията може да се преведе като съвпадение или съответствие. Въвеждането на една нова тематика в България, каквото е тази, изисква значителни усилия за въвеждане на съответните термини и на бъл-

## PDF Eraser Free

гарски език. Това е проблем, който повечето от нас се опиват да решават с различен успех, и дълг към българския език, който имаме като българи.

### 12. Лични впечатления

Не познавам лично докторантката, но имайки предвид, че разработва дисертационния си труд успоредно с работа в Митническата лаборатория на Агенция Митници, свършеното за 4 години е значително и заслужава адмирации. Този факт показва мотивираност, добра организация и целеустременост, все черти, които трябва да се уважават.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

*Дисертационният труд съдържа съществени научни и научно-практически резултати, които представляват оригинален принос в Органичната химия. Тези резултати отговарят напълно на всички изисквания изисквания(та) на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и съответния Правилник на ПУ „Паисий Хилендарски“. Нещо повече, съдържането на дисертационния труд значително надхвърля общоприетите критерии за образователната и научна степен ‘доктор’.*

Представените материали и дисертационни резултати напълно съответстват на специфичните изисквания на Химическия факултет на ПУ „Паисий Хилендарски“, приети във връзка с Правилника на ПУ за приложение на ЗРАСРБ.

Дисертационният труд показва, че докторантката Светлана Любенова Аврамова без никакво съмнение притежава задълбочени теоретични знания и практически умения по научна специалност Органична химия, както и нужната самостоятелност и организираност.

*Ето защо, убедено и без никакво съмнение давам своята положителна оценка за проведеното научно изследване и постигнатите резултати и приноси, както са представени в рецензираните по-горе материали, и предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен ‘доктор’ на Светлана Любенова Аврамова в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2 Химически науки, докторска програма по Органична химия.*

31.05.2018 г.

Рецензент:

проф. д-рн Людмил Антонов