

## 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” № Р33-2019/16.05.2016 г.

**относно** дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен '**доктор на науките**' в област на висше образование „Природни науки, математика и информатика”, професионално направление 4.2. „Химически науки”, Научна специалност „Аналитична химия” .

**Автор:** доц. д-р Пламен Николов Пенчев

**Тема:** “Компютърна интерпретация на молекулни спектри с цел разкриване на структурата на органични съединения”

### 1. Актуалност на тематиката

Представеният ми за оценка дисертационен труд е в областта на химичната информатика и хемометриката. Описано е разработването, прилагането, програмирането и едновременното използване на няколко математически метода за интерпретацията на УВ-Вид, ИЧ, Раман,  $^{13}\text{C}$  ЯМР и мас-спектри. Тематиката на дисертационния труд е актуална, предвид интеграцията на съвременните спектрални апарати с мощни компютърни системи, натрупаните огромни масиви от спектрални данни и необходимостта от бързо определяне на непознати молекулни структури в органичния анализ. Дори и за опитни експерти по органичен анализ е трудно да овладеят и прилагат еднакво добре всички методи на молекулната спектроскопия, поради което компютърно подпомогнатата интерпретация на спектри днес е незаменим инструмент в структурния анализ на органични съединения.

### 2. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Дисертационният труд е изложен на 313 страници и е организиран в три основни части: Литературен обзор (83 стр.), Спектроскопски измервания и софтуер (10 стр.) и Резултати и обсъждане (169 стр).

Литературният обзор е изключително обемен (обхваща 815 статии, 60 монографии и книги, както и 19 програмни продукта и ръководства или Интернет страници) и е старателно изготвен. Литературните данни в обзора са структурирани съобразно поставените цели и задачи, така, че да осигурят информация за по-ранните научни изследвания в областта и да

въведат читателя към проблематиката на дисертационния труд. Резултатите са представени детайлно и тяхното обсъждане е направено на висок научен стил.

Изследванията включват (1) търсене в библиотеки от УВ-Вид спектри, (2) интерпретационното търсене в библиотеки от  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектри, (3) ефективното използване на структурна информация, извлечена от мас-спектри, както и класификация мас-спектрите по структурни фрагменти, (4) прилагането на метода на най-близките съседи за ИЧ спектри, (5) подобряване на резултатите на метода на максималната подструктура и оценка на тяхната ефективност, (6) пълно отнасяне на  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектри на няколко органични съединения, синтезирани или изолирани от природата. Като резултат от работата на автора по дисертацията са създадени няколко спектрални библиотеки и три програми, работещи в среда на MS Windows. Създадени са спектрални библиотеки от 966 ИЧ, 330 Раман и 1086 УВ-Вид спектри, както и две библиотеки от 38 225 и 1000 напълно отнесени  $^{13}\text{C}$ -ЯМР спектри. Също така са създадени и няколко спектрални библиотеки със спектри, измерени в други лаборатории. Програмирани са седем метода за търсене в библиотеки от ИЧ спектри. Разработен и изследван е метод за качествен анализ на смеси по техните ИЧ или Раман спектри. Изследван е стандартен метод за анализ на смеси, чрез изваждане на ИЧ спектри и е подобрена идентификацията на компонентите на смеси. Разработени са два метода - на най-близките съседи и с използване на концепцията за максимална обща подструктура - за анализ на структурите в хит-списък, получен при търсене на спектъра на органично съединение в библиотека от ИЧ спектри. Разработен е метод за интерпретационно търсене в библиотеки от напълно отнесени  $^{13}\text{C}$ -ЯМР спектри. Предложено е кодиране на ароматност и тавтомерност на връзките, както и схема за отнасяне на сигналите в получените подструктури. Изследвана е връзката между спектралното подобие и структурното подобие за ИЧ и Раман спектри. Създадена е съвместна база от данни, съставена от ИЧ и Раман спектри на едни и същи съединения.

### **3. Публикации по дисертационния труд**

Резултатите от дисертационния труд са публикувани в 24 статии, от които 12 в списания с импакт фактор, 3 в български списания, но цитирани от чужди автори в в списания с импакт фактор и 4 в специализирани международни списания без импакт фактор. Пет от публикациите са в български списания без импакт фактор. Така изброените публикации са били цитирани общо 103 пъти.

## 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 ИОХ ЦФ. Представените материали и дисертационни резултати напълно удовлетворяват специфичните изисквания за придобиване на научната и образователна степен „Доктор на науките“.

Дисертационният труд показва, че авторът доц. д-р Пламен Пенчев **притежава** задълбочени теоретични знания и професионални умения в областите на химичната информатика и хеометриката, като **демонстрира** качества и умения за научно-изследователска работа на високо ниво.

Поради гореизложеното, убедено давам своята **положителна оценка** за представения дисертационен труд и **предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен ‘доктор на науките’** на Пламен Николов Пенчев в област на висше образование: „Природни науки, математика и информатика“, професионално направление 4.2. „Химически науки“, Научна специалност „Аналитична химия“.

10.08.2016 г.

Изготвил становището: .....

доц. д-р Пламен Ангелов