

РЕЦЕНЗИЯ

от д-р Светлана Димитрова Симова, професор в ИОХЦФ-БАН

за материалите, представени за участие в конкурс
на дисертационен труд за присъждане на научна степен 'доктор на науките'

в Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“

в област на висше образование .“4. Природни науки, математика и информатика“
професионално направление .“4.2. Химически науки“
по научната специалност „Аналитична химия“

Автор: доц. д-р Пламен Николов Пенчев в катедра „Аналитична химия и компютърна химия“, Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“ на тема:

*„Компютърна интерпретация на молекулни спектри с цел разкриване на
структурата на органични съединения“*

1. Предмет на рецензиране

Със заповед № Р33-1523 от 14.04.2016 г. на Ректора на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“ (ПУ) съм определена за член на научното жури за осигуряване на процедура за защита на дисертационен труд на тема „Компютърна интерпретация на молекулни спектри с цел разкриване на структурата на органични съединения“ за придобиване на научната степен ‘доктор на науките’ на ПУ в област на висше образование .“4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление .“4.2. Химически науки“. Автор на дисертационния труд е доц. д-р Пламен Николов Пенчев - катедра „Аналитична химия и компютърна химия“ към Химически факултет на Пловдивски университет "Паисий Хилендарски"

Представеният от доц. д-р Пламен Николов Пенчев комплект материали на хартиен и електронен носител е в съответствие с Чл.45 (4) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ и включва следните документи:

- молба до Ректора на ПУ за разкриване на процедурата;
- автобиография в европейски формат;
- копие от диплома за образователната и научна степен „доктор“;
- протокол от разширен катедрен съвет, свързан с откриване на процедурата и с предварителното обсъждане на дисертационния труд;
- автореферат;
- списък на научните публикации по темата на дисертацията;
- дисертационен труд;
- справка за спазване на специфичните изисквания на Химическия факултет;
- декларация за оригиналност и достоверност на приложените документи;

- копия на научните публикации по темата на дисертационния труд;
- диплома за образователна и научна степен „доктор“ – нотариално заверено копие;
- списък на цитати на публикациите, включени в дисертацията;

Дисертантът е приложил включените в дисертационния труд 24 публикации и 103 забелязани в литературата цитата за тях. Актуална справка за кандидата показва общ h – индекс = 8 за 23 реферирани в Scopus публикации, 340 цитата за тях и 52 съавтора, което е индикация за разпознаваемост и интердисциплинарен подход при работата на кандидата при поставените цели.

Без колебание мога да кажа, че документацията представена от д-р Пенчев по конкурса е добре оформена и съдържа необходимата информация.

2. Кратки биографични данни

Доц. Пенчев е роден през 1962 г. Възпитаник е на Националната математическа гимназия в София, ВХТИ „София“ и ПУ „Паисий Хилендарски“. През 1989 г. придобива магистърска степен, а през 1989 г. защитава дисертация и придобива ОНС ‘доктор’. Трудовата биография на д-р Пенчев в периодите 1989-2001 г. и от 2006 г. досега протича в Катедрата по аналитична и компютърна химия на ХФ на ПУ, отначало като химик през степените асистент, старши и главен асистент, а през 2010 г. се хабилитира като доцент. В периода септември 2001 до февруари 2006 г. специализирала като пост-докторант в департамента по химия и биохимия на държавния университет в Аризона, САЩ. Краткосрочни специализации провежда и в Техническият университет на Виена (1995 – 1997 г.) и Университета в Саарбрюкен (2000 г.). Успешно съвместява преподавателска и изследователска работа, ръководи дипломанти и докторанти, подготвя учебни помагала.

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

Дисертационният труд си поставя задачи към актуалния проблем, който все още не е намерил задоволително решение в литературата, за автоматизирано извеждане структурата на нови органични съединения от молекулни и мас-спектри. Темата представлява предизвикателство в научен аспект, тъй като е комплексна, включва използването на поредица от различни инструментални методи и разнообразни компютърни методи за обработка на резултатите от тях. Формулираната основна цел - разработване, прилагане, програмиране и едновременно използване на математически методи за интерпретацията на УВ-Вид, ИЧ, Раман, ^{13}C ЯМР и мас-спектри – е добре обоснована и много обемна. Тя включва методи за търсене в спектрални библиотеки, регресионен анализ на спектри, определяне на максимална обща структура и класификация на молекулни спектри с използването на няколко класификационни алгоритъма: линеен дискриминантен анализ, изкуствени невронни мрежи и методи на максимална обща подструктура и на най-близките съседи. Обърнато е внимание и на практическото приложение на създадените подходи и методики.

4. Познаване на проблема

Литературният обзор е изключително подробен. Описан е на 95 страници текст и 47 страници библиографска справка за 815 публикации, 60 монографии и 19 програмни продукта, съдържащи и много интернет източници. Материята е представена в лесно разбираем вид и ясно показва, че дисертантът познава в детайли проблема, както от теоретична, така и от експериментална гледна точка.

5. Методика на изследването

Избрани са различни методики на изследване в зависимост от използваните инструментални методи, които предоставят експерименталните данни. Намирам, че този подход е подходящ за търсене на решение на поставените задачи, което се потвърждава от постигнатите резултати.

6. Характеристика и оценка на дисертационния труд

Дисертацията е написана на 265 страници (без библиографията), съдържа 45 уравнения, 68 таблици, 53 фигури, и едно приложение. Литературните източници, на които се позовава изложението, са изключително изчерпателни и покриват времето от 1951 г. до наши дни. В увода са дефинирани целите и задачите на дисертацията. Дисертацията е представена в три основни глави – литературен обзор, спектроскопски изследвания и софтуер, и резултати и обсъждане. На една страница са обобщени резултатите и приносите на дисертацията. Литературният обзор добре представя състоянието на проблема към настоящия момент, а вторият раздел изчерпателно описва използваните експериментални методи и софтуер. Изобилният илюстративен материал не оставя съмнение за достоверността на материала, върху който се градят приносите на дисертационния труд. Основните резултати са представени в осем обобщени приноса. Повечето резултати са публикувани в научния периодичен печат след щателно рецензиране, което е доказателство за достоверност. Някои от изследванията включени в дисертацията, са финансирани от Фонд “Научни изследвания”, от Националния институт по здравето, САЩ и от ПУ “П. Хилендарски”. По темата на дисертацията са защитени 7 дипломни работи със (съ)ръководител д-р Пенчев.

7. Приноси и значимост на разработката за науката и практиката

Представените изследвания са оригинални и получените научни резултати могат да се отнесат към категориите новости за науката и обогатяване на съществуващите знания. Като „новости в науката“ бих отнесла:

- методите за търсене в библиотеки от ИЧ спектри по спектрална крива чрез търсене по скаларно произведение на пикови таблици, оптимизирани за идентификация на органични съединения;

- метода за интерпретационно търсене в библиотеки от ^{13}C -ЯМР спектри, кодирането за ароматност и тавтомерност на връзките и схемата за отнасяне на сигналите в получените подструктури, подходящи и за интерпретация на спектри на природни съединения.

Към „потвърждаване/допълване на хипотези“ бих включила следните приноси, които не са нови, но са ценни в научен и приложен аспект.

- метод за качествен анализ на смеси по техните ИЧ или Раман спектри посредством статистически анализ и/или чрез визуална оценка, който може да се използва също за идентификация на единично съединение по неговия ИЧ спектър;

- два метода, основани на най-близките съседи и използване на концепцията за максимална обща подструктура за анализ на структури от хит-списък, получен при търсене на спектъра на органично съединение в библиотека от ИЧ спектри.

Към „обогатяване на съществуващите знания с нови факти, съдържащи елементи на новост“ са:

- създадените спектрални библиотеки от 966 ИЧ, 330 Раман и 1086 УВ-Вид спектри, както и две библиотеки от 38 225 и 1000 напълно отнесени ^{13}C ЯМР спектри;

- предложените четири евристики, които подобряват идентификацията на компонентите на смеси посредством изваждане на ИЧ спектри;

- създадените съвместни база от данни, съставени от ИЧ и Раман спектри на едни и същи съединения;

- еднозначното отнасяне на ^1H - и ^{13}C -ЯМР спектри на шест органични съединения. Предложените програми са свободно достъпни в интернет, но не е отбелязано внедряване извън практиката на лабораторията на дисертанта. Перспективи за използването им е налице, ако програмите се снабдят с подробно ръководство за използването им, вкл. разработено на подходящо подобрени примери.

8. Преценка на публикациите по дисертационния труд

В дисертационния труд са включени 24 публикации, от които 12 са отпечатани в специализирани международни списания с импакт фактор като *J. Chem. Inform. Model.*, *J. Chem. Inform. Comput. Sci.*, *Nat. Prod. Comm.*, *J. Mol. Struct.*, *Anal. Chim. Acta.* и други. Три публикации са в български списания без импакт фактор, но цитирани от несвързани с общи публикации чуждестранни автори. Четири от публикациите са в специализираното списание *Asian Chemistry Letter*, което е без импакт фактор. Пет от публикациите са в годишници на българските университети в Пловдив и Русе, които са без импакт фактор. В 12 от публикациите д-р Пенчев е първи автор, а в 8 - втори, като водещата роля на дисертанта в публикациите не подлежи на никакво съмнение. Основни съавтори на докторанта са Курт Вармуца, Георги Андреев, Мортън Мънк, Клаус-Питър Шулц и Петър Бозов, чието влияние е изрично подчертано в

дисертационния труд. Не са представени данни за постери и доклади на национални и международни конференции.

9. Лично участие на автора

Личното участие на дисертанта е не само безспорно, то е водещо. Считаю, че получените резултати и обобщените приноси са предимно негова заслуга. Някои от отбелязаните в публикациите съавтори по-горе вероятно имат принос в анализа на резултатите, но самата дисертация очевидно изцяло е заслуга на д-р Пенчев, доказано и чрез убедителното му представяне на предварителната защита.

10. Автореферат

Авторефератът е направен според изискванията и обобщава съдържанието на дисертацията. Препоръчително е след известна преработка оформянето му в самостоятелна публикация на дисертанта за повишаване видимостта на проведените изследвания и обобщения.

11. Критични забележки и препоръки

Към дисертационния труд нямам критични забележки по същество, освен тези които отправих около предварителната защитата, които са взети предвид в настоящия вариант.

12. Лични впечатления

Познавам д-р Пенчев като любопитен, мотивиран, целенасочен и систематичен изследовател от 2000 г., когато двамата специализирахме по едно и също време в Университета в Саарбрюкен. В последните години общувам с него главно като ползвател на спектралната ЯМР апаратура в ИОХЦФ-БАН. Макар и своенравен, той е прецизен и задълбочен в изследванията си.

13. Препоръки за бъдещо използване на дисертационните приноси и резултати

Бих препоръчала допълване на предложената програма за интерпретационно търсене в библиотеки от отнесени ^{13}C -ЯМР спектри с подробна информация за позването й.

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 Факултета, приети във връзка с Правилника на ПУ за приложение на ЗРАСРБ.

Дисертационният труд показва, че дисертантът **доц. д-р Пламен Николов Пенчев притежава** задълбочени теоретични знания и професионални умения по научните специалности „Аналитична химия“, „Теоретична химия“ и „Органична химия“ като **демонстрира** качества и умения за провеждане на изследвания с получаване на оригинални и значими научни приноси.

Поради гореизложеното, убедено давам своята **положителна оценка** за проведеното изследване, представено от рецензираните по-горе дисертационен труд, автореферат, постигнати резултати и приноси, и **предлагам на почитаемото научно жури да присъди научната степен ‘доктор на науките’** на доц. д-р Пламен Николов Пенчев в област на висше образование: „4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление „4.2. Химически науки“, по научната специалност „Аналитична химия“.

19. 08. 2016 г.

Рецензент:

/проф. дхн Светлана Симова/