

СТАНОВИЩЕ

от проф. Веселин Петров Баев,
от катедра Молекулярна биология,
Биологически факултет, ПУ „П. Хилендарски“

върху материалите за защита на дисертация
за придобиване на образователна и научна степен „Доктор“
Област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика
Професионално направление: 4.2. Химически науки

Докторска програма: Теоретична химия

Докторант: ГЕРГАНА ИЛИЕВА ТАНЧЕВА

Тема на дисертационния труд: „Приложение на методите на химичната информатика при мултикомпонентни субстанции и наноматериали“

Научен ръководител: доц. д-р Николай Кочев

Заповед на Ректора на ПУ за определяне на състава на НЖ: РД-21-1840/23.10.2024 г.

Материалите свързани със защитата на докторанта за присъждане на образователна и научна степен „доктор“ на Гергана Танчева са ми представени в електронен формат. Представеният от Гергана Танчева комплект материали на електронен носител е в съответствие с Чл. 36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ „Паисий Хилендарски“. Документите включват:

- 1) Молба до Ректора на Пловдивския университет за разкриване на процедура за защита и присъждане на ОНС „доктор“;
- 2) Автобиография по образец;
- 3) Протокол от Катедрения съвет за предварително обсъждане на дисертацията и становище на научния ръководител за докторанта;
- 4) Автореферат на дисертацията на български и английски език;
- 5) Декларация за оригиналност;
- 6) Справка за минимални изисквания;
- 7) Списък на публикациите;
- 8) Дисертационен труд на български език;
- 9) Публикации в пълен текст.

Биографични данни

През 2016 г. Гергана Танчева завършва бакалавърската специалност „Медицинска химия“ към Химическия факултет на Пловдивския университет. Една година по-късно тя придобива магистърска степен по „Спектрохимичен анализ“ във същото звено. От 2019

тя е докторант в Катедрата по „Аналитична химия и компютърна химия“ на същия университет. Трябва да се отбележи, че успоредно с това Гергана Танчева работи като лабораторен специалист към ВиК „Софийска вода“ (2017-2018), специалист по анализ и контрол на храни и околна среда в „Юрофинс Хос Тестинг България“ ЕООД (2018-2022), както и като химик информатик в „Идеяконсулт“ ООД (2022- до момента).

Актуалност и значимост на тематиката

Темата на дисертацията е изключително актуална, тъй като засяга работа в интердисциплинарната наука „Химична информатика“ или „Хемоинформатика“ и приложенията ѝ в развиващото се производство на мултикомпонентни субстанции. Дисертацията има за основна цел да се изследват възможностите на хемоинформатиката за обработка и съхранение на данните за мултикомпонентни вещества, наноматериали и нови материали и откриване на перспективи за ефективна обработка на информацията чрез семантичен FAIR анализ. Смятам, че целта на изследванията е добре дефинирана, значима и актуална.

Дисертационен труд

Представеният дисертационен труд е представен на 196 страници, като е разделен на четири дяла: 1) Литературен обзор; 2) Цел и задачи на дисертацията; 3) Постигнати резултати по задачите от дисертационния труд и 4) Обобщения на дисертационния труд. *Прави впечатление, че в дисертационния труд няма ясно обособен раздел „Материали и методи“, а основните източници на материали и използвани методи са разпръснати в литературния обзор и резултатите.*

Методология на изследванията

Подбран и използван е семантичният модела за данни на Ambit/eNanoMapper за представяне на информацията за мултикомпонентни субстанции и наноматериали, чрез който са реализирани принципите FAIR за представените химични обекти. Използвани са платформа за FAIR-ификация на данни за химични обекти, както и външни инструменти като Jupyter бележници, платформите за машинно обучение и анализ на данни в KNIME и Orange, работни потоци в платформата Ploomber и др. Смятам че, методите и материалите са добре подбрани за целта и задачите на дисертационния труд.

Резултати и приноси на дисертационния труд

Дисертационният труд представя разработка/концепция за FAIR-ификация на експериментални данни за наноматериали, базирана на модел за данни Ambit/eNanoMapper. Създаден е прототип за идентификатор за наноматериали, който демонстрира възможностите на линейната нотация SLN. Обогатена е базата данни и онтологията на eNanoMapper с висококачествени FAIR данни, с информация за безопасността на наноматериали от няколко големи европейски проекта. Разработена е

софтуерна библиотека и модул за платформата Orange - ToxFAlRy, за анотация и обработка на HTS данни.

Публикации, участие в научни форуми и обучителни курсове

Резултатите от дисертационният труд са публикувани в 2 научни статии в следните списания със висок кватрил: Nanomaterials (Q1), Mol. Informatics (Q2), и в една глава от книга „Data Integrity and Data Governance“. Базата данни Скопус показва, че и двете статии имат цитируемост, едната от които с голям брой набрани цитати - 17 (Nanomaterials), което показва високото признание на тематиката и на постигнатите резултати.

Освен научни публикации, докторант Гергана Танчева участва усилено в различни национални и международни форуми с 9 постера и 3 доклада. Допълнително, трябва да се спомене и участието на докторанта във 5 проекта, както и в редица обучителни курсове повишаващи уменията на кандидата във областта на Python и QSAR.

Автореферат

Представен е автореферат на български език от 32 страници и на английски език от 30 страници, направени според изискванията и отразяват основните резултати от дисертационния труд.

Заклучение

Представените материали по настоящата процедура **отговарят на изискванията** на ЗРАС в РБ, и минималните национални изисквания. Дисертационният труд показва, че докторантката Гергана Танчева притежава задълбочени знания, професионални умения и значими резултати в областта на Химичната информатика. Предвид на това и гореизложеното, **давам своята положителна оценка** за присъждане на ОНС “доктор” на Гергана Илиева Танчева в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление: 4.2. Химически науки; научна специалност: Теоретична химия.

17.12.2024
Гр. Пловдив

Изготвил становището.....
Проф. д-р Веселин Баев