

# СТАНОВИЩЕ

от Професор дхн Иван Петков Бангов

(н.ст., име, презиме, фамилия )

на дисертационен труд

ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА ОБРАЗОВАТЕЛНАТА И НАУЧНА СТЕПЕН

„ДОКТОР”

Област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика. Професионално направление 4.2. Химически науки

Докторска програма Теоретична химия

Научен ръководител: доц. д-р Николай Кочев

**Автор:** *Гергана Илиева Танчева*

**Тема:** ПРИЛОЖЕНИЕ НА МЕТОДИТЕ НА ХИМИЧНАТА ИНФОРМАТИКА  
ПРИ МУЛТИКОМПОНЕНТНИ СУБСТАНЦИИ И НАНОМАТЕРИАЛИ.

## 1.Общо представяне на процедурата и дисертанта

Дисертационният труд на Гергана Танчева е обсъден и насочен за защита на заседание на разширен катедрен съвет на Катедра аналитична химия и компютърна химия на Химически факултет при Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, проведено на 14.10.2024 г.

## 2. Актуалност на тематиката.

Настоящата дисертация е в една нова тематика, поне в рамките на нашата страна. Както отбелязва дисертантката, докато приложението на хемоинформатиката за молекулни системи е добре разработена тематика през последните 40 години то едно ново предизвикателство е да се разработят подходи и методи за приложение на методите на химичната информатика за обработка и съхранение на информацията за мултикомпонентни вещества, наноматериали и нови материали, както и откриване на перспективи за ефективна обработка на информацията чрез семантичен FAIR модел за данни и приложението му при научни експерименти и моделиране при наноматериали и смеси от химични субстанции.

## 3. Познаване на проблема

Дисертационният труд е разделен на 4 раздела, като първият раздел е литературния обзор. Искам да отбележа, че този раздел е написан доста интелигентно и показва добро познание на литературата по дадения въпрос. Основна тежест е дадена на представянето на наноматериалите, както по техните свойства, така и относно тяхната токсичност. Отбелязано е, че безопасността на наноматериалите е основна тема в няколко рамкови програми на Европейската комисия през последното десетилетие.

Представени са различните дефиниции на отделно химическо вещество или елемент и смес или UVCB субстанции според различните регламенти, UIPAC, Законът за контрол на Химично вещество САЩ (TSCA), регламента на ЕС REACH, Британският регламент, както и регламента ISO и др. Разгледани са материали с нови или подобрени функционалности AdMa (Advanced Materials). Разгледани са различните класификации на химичните субстанции по произход, според структурен състав, според броя измерения, според поръзност, според токсичност. Разгледани са свойствата на наноматериалите и подходи за синтез, Дисертантката се е запознала с класическите методи на химичната информатика за представяне на химични обекти и съответните QSAR/QSPR методи за тяхната обработка с теория на молекулните дескриптори, и др. Дисертантката се е запознала с химичните бази и с електронни бележници, с модели за данни за химични субстанции и наноматериали. Придобитите знания са една добра основа както за по нататъшната разработка на дисертационния труд, така и определят образователната част на дисертационния труд.

#### **4. Методика на изследването.**

Изследванията в дисертационния труд са организирани в 16 задачи. Тук ще маркираме най-важното от тях. Собствените изследвания са подчинени на FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) принципи при управление на данни. Бива избран модела за данни на *Ambit/eNanoMapper* за представяне на информацията за мултикомпонентни субстанции и наноматериали. Предвижда се използване на JSON за конвертиране на EXCEL файлове с експериментални данни за наноматериали, както изследване на въпросът за безопасност на наноматериалите. екотоксичност и замърсяване на околната среда. Разработване на библиотеката *AmbitSLN*, както и както и електронни бележници за свързване със софтуерни библиотека RDkit и CACTUS. Създаване на модул Orange3-ToxFAIRy към аналитична платформа Orange, който може да се ползва като потребителски интерфейс към софтуерната библиотека ToxFAIRy.

#### **5. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите**

Както се вижда в тази дисертация са заложили разнообразни задачи, които изискват огромен труд и добро познаване на материала за осъществяване на този дисертационен труд.

#### **6. Преценка на публикациите и личния принос на дисертанта**

Докторантката е публикувала в колектив 3 публикации, като едната е глава от монография, която представяше голям интерес за мен. Първата работа е събрала 16 цитата, а втората 1 цитат. Участвала в 9 научни мероприятия с постери и 3 - с доклади, онлайн. Докторантката е участвала в 5 международни научни проекта.

## 7. Автореферат

Авторефератът е структуриран добре и дава добра информация за извършената работа по дисертационния труд.

## 8. Препоръки за бъдещо използване на дисертационните приноси и резултати •

В дисертацията са начертани насоки за бъдещо развитие, от които се откроява разработване на софтуерни инструменти за изчисляване на дескриптори и индекси, както и амбициозната задача за приложение на нови модерни алгоритми, базирани на изкуствен интелект, за моделиране на QSPR/QSAR анализ. Аз бих препоръчал, след създаването на нови дескриптори да се използва и методът на дескрипторните фингърпринти, разработен от мен и професор Дойчинова за търсене в базите за данни.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Въз основа на представената ми документация на научните постижения и научната активност на докторантката *Гергана Илиева Танчева* моето мнение е, че следвайки изискванията на **ПРАВИЛНИКА ЗА ПРИЛАГАНЕ НА ЗАКОНА ЗА РАЗВИТИЕТО НА АКАДЕМИЧНИЯ СЪСТАВ В РЕПУБЛИКА БЪЛГАРИЯ** тя напълно заслужава да получи образователната и научна степен **ДОКТОР**.

21.12.2024 г.

**Изготвил становището:**

професор дхн Иван Петков Бангов