

# СТАНОВИЩЕ

от проф. дхн Васил Борисов Делчев,  
от катедра Физикохимия, Пловдивски университет  
върху материалите за защита на дисертация  
за придобиване на образователна и научна степен „доктор”  
в кат. Аналитична химия и компютърна химия,  
Химически факултет – Пловдивски университет

*Област на висше образование:* 4. Природни науки, математика и информатика

*Професионално направление:* 4.2. Химически науки

*Научна специалност:* 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, кат. АХКХ, ПУ

---

Заповед на Ректора на ПУ за определяне на състава на НЖ: **РД-21-1840/24.10.2024 г.**

Решение на първото заседание на НЖ: **да изготвя становище.**

---

Материалите по защитата на докторската теза за присъждане на образователна и научна степен „доктор” на Гергана Илиева Танчева са представени в дигитален формат на интернет-платформа. Те 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; 4) становище на научния ръководител за докторанта и дисертацията; 5) автореферат на дисертацията на български и английски език; 6) списък на публикациите; 7) дисертационен труд на български език, 8) справка за спазване на минималните национални изисквания за придобиване на ОНС „доктор”.

## *Биографични бележки*

Докторант Гергана Танчева завършва обучение по бакалавърската програма „Медицинска химия” на Пловдивския университет през 2016 г. В същата година започва обучение по магистърска програма „Спектрохимичен анализ” отново в същия университет, кат. Аналитична химия и компютърна химия, която завършва успешно през 2017 г. Веднага след това е стажант в Института по органична химия с център по ФХ (БАН – София), където се занимава с охарактеризиране на състава на розови масла с различни аналитични техники. В периода 2017 – 2018 г. тя работи като лабораторен специалист в ЛИК „Софийска вода”, звено Питейни води, където се занимава с анализ на питейни води, в това число за наличие на тежки метали. От 2018 г. до 2022 г. докторант Танчева е химик-аналитик в „Юрофинс ХОС Тестинг България” ЕООД, София. От 2022 г. до момента работи като разработчик в “Идеяконсулт” ООД, София, където разработва софтуер за автоматична обработка на *in vitro* данни. От 2019 г. до сега, Гергана Танчева е докторант в кат. Аналитична химия и компютърна химия на Пловдивския университет. Изследванията ѝ са свързани със създаване и тестване на методи за моделиране на физикохимични свойства и биологична активност (QSPR/QSAR) и др.

## *Значимост на тематиката*

Дисертацията съдържа оригинални и значими за съвременната наука резултати, които се представят за първи път. Извършени са голям брой научно-изследователски дейности, които са описани в детайли в дисертацията. Усъвършенствани са модули на eNanoMapper с добавки и филтри. Изпробвани са семантични модели в Ambit/

eNanoMapper за FAIR-ификация на данни за мултикомпонентни субстанции и наноматериали. В това число създаден е софтуер за конвертиране на EXCEL файлове с данни. Създадени са софтуерна библиотека, шаблон за *in vitro* данни, модули към Orange и други.

### *Дисертация*

Дисертационният труд е написан на 196 страници и е структуриран в седем глави. Представен е доста подробен литературен обзор, който е разположен на малко над 60 страници. Моето виждане е, че той би могло малко да се съкрати – основно със законодателната информация, описана в него. В литературния обзор са описани 189 източника, повечето от последните години. В глава II са формулирани ясно целта на изследванията и научно-изследователските задачи. Научните изследвания на докторанта са представени в глава III и IV на 80 страници. В приложение са дадени шаблони, файлове и работни екрани, които подкрепят основното изложение на научните изследвания.

### *Основни приноси на дисертацията*

Основните приноси на изследванията в дисертацията имат научен и приложен характер. Чисто научни приноси са: 1) изработената концепция за FAIR-ификация на експериментални данни за наноматериали за представяне на информацията за мултикомпонентни субстанции, посредством семантичен модел за данни Ambit/eNanoMapper и с помощта на NMDataParser; 2) създаден е прототип за идентификатор за наноматериали чрез използване на линейната нотация SLN; 3) разработена е концепция за аотиране на HTS данни с метаданни и изчисляване на токсикологичен приоритизиращ индекс посредством Tox5-Score.

Приносите с приложен характер могат да се обобщят както следва: 1) приложен е FAIR-ификационен модел за 1400 EXCEL файла, чрез който се обогатихме базата данни на eNanoMapper за безопасността на наноматериали; 2) обогатена е онтологията eNanoMapper в областта на екотоксичност с нови термини; 3) разработена е софтуерна библиотека ToxFAIRy, за аотация и обработка на данните, изчисляване на приоритизиращия индекс и FAIR-ификация на HTS данни. 4) разработен е модул Orange3-ToxFAIRy към платформата Orange. 5) развит е автоматизиран работен процес на платформата Ploomber, обхващащ възможностите на библиотеката ToxFAIRy.

Всичко това показва висока научна подготовка на докторанта и способност да управлява бази данни и свързани с тях библиотеки.

### *Публикации и участие в научни форуми*

По материалите в дисертацията са отпечатани три публикации в престижни научни издания от научната област на докторанта и нейния ръководител. Съгласно SJR първата статия (DOI: 10.3390/nano10101908) има квантил Q1, втората (DOI: 10.1002/minf.202100027) - квантили Q2, докато третата не е налична в базите данни Scopus и WoS. Така по показател Г докторантът събира общо 51 точки, при изискуем минимум от 30 точки. Очевидно изискуемият минимум се надхвърля. Върху работата с квантил Q1 са налични 17 цитирания (Scopus) при отбелязани 16 в дисертацията. Публикация A2 е цитирана 1 път.

Прави впечатление многобройното участие на докторанта в научни форуми! Резултатите по дисертацията са представени на 12 конференции. Девет от тях са постерни участия и три устни доклада, всички на международни конференции, проведени в онлайн формат. Международните постерни участия са 4, а 5 са на научни форуми в България.

### *Автореферат*

Авторефератът на български език съдържа 32 страници. В него са включени основните моменти от дисертацията. Добро впечатление прави точка 9.3 от него, в която се посочват насоки за бъдещо развитие на проблемите, описани в дисертацията. Смятам, че библиографията в автореферата би могло да се спести. Приложен е също автореферат на английски език, съгласно националните и местни правила за добиване на ОНС „доктор”.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Представените материали по настоящата процедура отговарят на изискванията на ЗРАС в РБ, неговите правилници и минималните национални изисквания в професионалното направление. Считаю, че Гергана Танчева е изграден учен и може да провежда самостоятелни изследвания в областта на химичната информатика. Предвид на това и гореизложеното, давам своята **положителна оценка** за присъждане на ОНС “доктор” на маг. 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 г.  
гр. Пловдив

Изготвил: