

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Станимир Петров Манолов

Химически факултет, Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен „доктор“ по:

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

професионално направление: **4.2. Химически науки**

докторска програма: **Аналитична химия**

Автор: Димитър Генчев Стоицов

Тема: „Отнасяне на ЯМР и вибрационни спектри при потвърждаване и разкриване на структурите на ароматни органични и металоорганични координационни съединения“

Научни ръководители:

1. Проф. д.х.н. Пламен Николов Пенчев – Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, катедра „Аналитична химия и компютърна химия“.
2. Доц. д-р Марин Нейков Маринов - Аграрен университет-Пловдив, Факултет по растителна защита и агроекология, катедра „Химия, фитофармация и Екология и опазване на околната среда“.

1. Общо представяне на процедурата и докторанта

Със заповед № РД 22-1706 от 21.07.2025г. на Ректора на Пловдивския университет „П. Хилендарски“ (ПУ) съм определен за член на научното жури за осигуряване на процедура за защита на дисертационен труд на тема *“Отнасяне на ЯМР и вибрационни спектри при потвърждаване и разкриване на структурите на ароматни органични и металоорганични координационни съединения“* за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма „Аналитична химия“. Автор на дисертационния труд е Димитър Генчев Стоицов – докторант в редовна форма към катедрата по „Аналитична химия и компютърна химия“ с научни ръководители проф. д.х.н. Пламен Николов Пенчев от ПУ „Паисий Хилендарски“ и доц. д-р Марин Нейков Маринов от Аграрен университет - Пловдив.

Представеният от докторанта Димитър Стоицов комплект материали на електронен носител е в съответствие с Чл.36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ и включва всички необходими документи. Докторантът е приложил дисертационен труд,

автореферат и 4 броя публикации в специализирани списания, индексирани в базите данни *Web of Science* и *Scopus*.

Димитър Стоицов е зачислен като редовен докторант на 01.03.2021г., а от 01.03.2025г. е отчислен с право на защита, като в този период работи като асистент в Химическия факултет на ПУ „Паисий Хилендарски“.

2. Актуалност на тематиката

Изследванията, насочени към потвърждаване и разкриване на структурите на органични и металоорганични съединения, са от ключово значение за развитието на съвременната химия. Синтезът на нови вещества с биологична активност или със специфични физико-химични свойства неминуемо изисква надеждно структурно характеризиране. Именно тук спектралните методи, и по-специално ЯМР и вибрационната спектроскопия (IR и Раман), се утвърждават като основни подходи за анализ.

Развитието на високочувствителни апаратури и усъвършенствани методи за едномерни и двумерни ЯМР експерименти, както и наличието на компютърни софтуери за обработка и симулация на спектри, значително разширяват възможностите за получаване на надеждна информация за молекулната структура. Въпреки това, в литературата все още съществуват редица органични и металоорганични съединения, за които данните са частично отнесени, непълни или погрешно интерпретирани.

В дисертацията са представени допълнителни вибрационни данни за представители на няколко класа органични и координационни съединения, включително новосинтезирани. Това не само подпомага правилното им структурно охарактеризиране, но и допринася за обогатяване на базите данни, използвани от научната общност за сравнителен анализ и прогнозиране на спектри.

В контекста на съвременната наука, където синтезът на нови лекарствени вещества, катализатори и функционални материали се базира върху задълбочено познаване на молекулната структура, тематиката на дисертацията е напълно актуална и с висока приложна стойност.

3. Познаване на проблема

Авторът демонстрира задълбочено познаване на съществуващите проблеми в областта, като отчита, че изолираната интерпретация на само един тип спектри (например само 1D ЯМР или само вибрационни спектри) често не е достатъчна за надеждно структурно определяне. В дисертационния труд е направен подробен обзор на едномерни и двумерни ЯМР методи (^1H , ^{13}C , COSY, HSQC, HMBC, NOESY и др.), както и на вибрационната спектроскопия (IR и Раман), като са изяснени техните предимства, ограничения и приложимост за различни класове органични и координационни съединения.

Познаването на проблема се изразява още и в критичния анализ на съществуващите бази данни и софтуерни средства за симулация и интерпретация на спектри. Подчертана е

необходимостта от предоставяне на напълно отнесени ЯМР данни за нови или рядко изследвани структури, които да подпомогнат не само конкретното структурно охарактеризиране, но и развитието на глобални референтни ресурси.

Обзорът обобщава и основните класове съединения, включени в дисертацията, сред които са флуоренилспирохидантоини, нафтопиранони, пиримидинови комплекси на Au(III) и Cu(II), диспироимидазолидини, *N*-фенил-2-(2,2,2-трихлороацетамидо) бензамиди и ¹H-бензо[d]изохинолин-1,3(2H)-диони. Също така е разгледано приложението на специализиран ЯМР софтуер за подпомагане на потвърждаването и разкриването на тези органични структури, което улеснява интерпретацията и повишава точността на анализа.

Използваните 157 литературни източника, 36% от които са от последните 10 години, показват добрата литературна информираност на докторант Стоицов.

4. Методика на изследването

Методиката на изследването е разработена с висока степен на прецизност и яснота, като обхваща подробно използваната апаратура, условията на работа и приложените техники за регистрация на спектралните данни. Димитър Стоицов е осигурил възпроизводимост и надеждност на резултатите чрез стриктно дефинирани параметри за измерванията на ИЧ, Раман и ЯМР спектри, както и чрез използването на стандартизирани процедури и подходящи вътрешни и външни стандарти. Включването на различни методи – FT-IR, ATR, Раман, 1D и 2D ЯМР, твърдофазни CP-MAS техники и атомноспектрални анализи – демонстрира комплексен и интердисциплинарен подход към изследваните съединения и техните комплекси. Този широк спектър от експериментални методи осигурява висока аналитична стойност на дисертационния труд и гарантира обективността и валидността на получените резултати.

5. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Дисертацията е изготвена на високо научно ниво с обем от 144 страници и включва следните основни раздели: Увод (8 стр.), Раздел 1: Литературен обзор (31 стр.), Раздел 2: Материали и методи (3 стр.), Раздел 3: Резултати от спектралните отнасяния (75 стр.), Заключение (2 стр.), Научни и научноприложни приноси (1 стр.), Списък на публикациите по темата (1 стр.) и Литературни източници (11 стр.).

Основните приноси на дисертационния труд могат да бъдат систематизирани както следва:

1. Допринасяне за обогатяване на научната литература чрез предоставяне на напълно отнесени ЯМР данни и частично отнесени вибрационни спектрални данни за различни класове органични съединения;

2. Коригиране на неточности в предходно публикувани и отнесени ЯМР данни за четири органични структури, включени в дисертацията;

3. Допринасяне за обогатяване на базата данни NMRShiftDB чрез въвеждане на структурите на флуоренилспирохидантоините и нафтопираноните, както и на част от отнесените за тях ^1H и ^{13}C ЯМР данни.

6. Преценка на публикациите и личния принос на докторанта

В списъка с научни публикации на Димитър Стоицов, свързани с дисертационния труд, са включени общо четири труда. От тях три са реферирани и индексирани в базите данни *Web of Science* и *Scopus*, а една публикация е индексирана единствено в *Scopus*. Две от публикациите са в списания с кuartил **Q2** – *Applied Sciences* (IF = 2.5) и *Crystals* (IF = 2.4), докато останалите две са в издания с кuartил **Q4** – *Molbank* (IF = 0.4) и *Bulgarian Chemical Communications* (без импакт фактор).

Индивидуалният принос на Димитър Стоицов е ясно проследим, като в две от публикациите той фигурира като първи автор, а в останалите две – като втори. Това свидетелства за негово съществено участие както в изготвянето, така и в оформянето на трудовете. Публикациите са реализирани през 2024 г. и отразяват съдържанието и научния принос на дисертационния труд. Към настоящия момент не са установени независими цитирания на разглежданите публикации, което е обяснимо предвид тяхната относителна новост и скорошното им публикуване.

Публикационната активност на докторанта напълно съответства на нормативните изисквания за придобиване на образователната и научна степен „доктор“. Минималните национални критерии, както и минималните изисквания, предвидени в Правилника на ПУ за РАС, са не само изпълнени, но и значително надхвърлени. Докторантът е представил четири публикации в реферирани и индексирани издания с кuartили Q2 и Q4 (62 точки при изискуеми 30).

7. Автореферат

Авторефератът (34 страници) е в пълно съответствие със съдържанието на дисертационния труд и представлява синтезиран вариант, отразяващ неговата същност. В него са представени в пълна и достоверна степен получените резултати, както и техният аналитичен преглед. Авторефератът е изготвен и на английски език в аналогичен обем (34 страници).

8. Препоръки за бъдещо използване на дисертационните приноси и резултати

Представеният дисертационен труд съдържа достатъчен по обем и научно обоснован изследователски материал, разработен в пълно съответствие с установените академични стандарти и изисквания за този тип трудове. Не откривам основания за критични бележки или съществени препоръки по отношение на проведеното изследване и начина на представяне на резултатите. Научният принос е безспорен, а изложението демонстрира висока степен на компетентност и методологична коректност. Препоръчвам докторантът да

продължи да развива своята научноизследователска дейност в областта със същата целеустременост, последователност и професионализъм.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд съдържа научни и научноприложни резултати, които представляват оригинален принос в науката. По своя обем и по броя на реализираните публикации той напълно отговаря на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и Правилника на ПУ „Паисий Хилендарски“.

Изследването убедително показва, че докторант Димитър Генчев Стоицов притежава задълбочени теоретични знания и необходимата професионална компетентност в рамките на докторска програма „Аналитична химия“. Трудът демонстрира неговите умения за самостоятелно и методологически коректно провеждане на научноизследователска дейност, което е показател за формирането му като зрял изследовател.

Поради гореизложеното, убедено давам своята **положителна** оценка за проведеното изследване и **предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен “доктор”** на Димитър Генчев Стоицов в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма „Аналитична химия“.

25.09.2025 г.

Изготвил становището:

(подпис)

.....

доц. д-р Станимир Манолов