

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. д-р Николай Георгиев Василев

Център по ЯМР спектроскопия,

Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия, БАН

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*

Научен ръководител: *Проф. д.х.н. Пламен Николов Пенчев - Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“ и Доц. д-р Марин Нейков Маринов - Аграрен университет – Пловдив*

1. Общо описание на представените материали

Със заповед № Р22-1706 от 21.07.2025 г. на Ректора на Пловдивския университет „Паисий 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 – редовен докторант към катедра Аналитична химия и компютърна химия с научни ръководители проф. д.х.н. Пламен Николов Пенчев от Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“ и доц. д-р Марин Нейков Маринов от Аграрен университет, Пловдив.

Представеният от Димитър Генчев Стоицов комплект материали на електронен носител е в съответствие с Чл.36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ, включва следните документи:

- молба до Ректора на ПУ за разкриване на процедурата за защита на дисертационен труд;
- автобиография в европейски формат;
- протокол от катедрения съвет, свързан с докладване на готовността за откриване на процедурата и с предварително обсъждане на дисертационния труд;
- становище от научните ръководители относно откриване на процедура за предварително обсъждане на дисертационен труд;
- автореферат на български и английски;
- декларация за оригиналност и достоверност на приложените документи;
- справка за съответствие с минималните изисквания за придобиване на ОНС „доктор“;
- списък на научните публикации по темата на дисертацията;
- копия на научните публикации;
- дисертационен труд;
- приложение с всички спектри по дисертационния труд.

Докторантът е приложил 4 публикации.

Представеният от докторант Стоицов комплект материали на електронен носител е в пълно съответствие с изискванията на ЗРАС в РБ и правилника за неговото прилагане, както и на правилника за РАС на ПУ „Паисий Хилендарски“.

Кандидатът е включил общо 4 публикации в дисертационния труд като всички са публикувани в специализирани международни списания с импакт фактор или импакт ранг. Резултатите от дисертационния труд са докладвани и на един научен форум.

2. Кратки биографични данни за докторанта

Димитър Генчев Стоицов е завършил *Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“*, където през 2019 г. придобива образователно-квалификационна степен бакалавър по специалност „Анализ и контрол“, а през 2020 г. магистърска степен по специалност „спект-рохимичен анализ“. В периода от ноември 2021 г. до 2025 г. е асистент в катедра „Аналитична химия и компютърна химия“ при Химически факултет на Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“. В периода от март 2021 г. до 2025 г. е редовен докторант в същата катедра. Дисертационният труд е обсъден и предложен за защита на разширено заседание на катедра „Аналитична химия и компютърна химия“ при Химически факултет на ПУ „Паисий Хилендарски“, състояло се на 26.06.2025 г.

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

Безспорна е актуалността на дисертацията. Директното установяване на структурата на изследвано с ЯМР спектроскопия съединение (от разтвор до структура без човешка намеса) е актуална тематика по която се работи отдавна и бе поставена като един от приоритетите в развитието на органичната химия на това десетилетие. Поставените и изпълнени задачи в дисертационния труд са стъпка в постигането на тази цел. Въпреки, че вече сме в ерата на изкуствения интелект (ИИ) и много алгоритми са налични за автоматично отнасяне и определяне на структурата на изследвани вещества посредством спектрални техники (УЧ, Раман и ЯМР), знанията и уменията в тази област остават незаменими в научната практика. Подобряването на наличните бази данни с нови надеждни отнасяния на нови класове съединения, както и корекция на грешки в тези бази данни е неотменна част от научното развитие.

4. Познаване на проблема

Разработката на общата част и литературния разбор ми направиха много добро впечатление. В литературния обзор са систематично представени както основите на ЯМР спектроскопията в разтвор и основните използвани техники, така и наличния свободен софтуер за потвърждаване и доказване на органични структури. Кандидата демонстрира много-добро познаване на проблемите, с които трябва да се справи в своята научна работа. Дисертационния труд е написан на 144 страници, като литературният обзор обхваща 46 страници. Литературната справка съдържа 157 цитата, от които 153 се отнасят за литературния обзор.

5. Методика на изследването

Кандидатът е формулирал по следния начин целта на работата си по дисертацията: да се предоставят напълно отнесени ЯМР данни, подкрепени с частично отнесени вибрационни данни, за нови или познати органични съединения от различни класове, за които не съществуват или съществуват само частично и/или грешно отнесени ЯМР и вибрационни данни в литературата. Поставените задачи са адекватни за изпълнение на целта на дисертацията. Избраната методика включваща използването както на едномерни, така и на двумерни ЯМР спектри и позволява постигането на поставената цел.

6. Характеристика и оценка на дисертационния труд

Дисертационният труд е структуриран по следния начин: Увод, Цел и задачи, Литературен обзор, Методи и материали, Резултати, Заключение, Приноси и Приложение. В глава Увод се доказва актуалността и се дефинират основните термини на дисертационния труд. Представя се целта на дисертацията и за нейното постигане се набелязват научните задачи на изследванията по дисертационния труд. Следва кратък обзор на някои 1D и 2D ЯМР спектри,

характеристични вибрационни интервали и класове органични съединения, които са изследвани в дисертационния труд. Следва представяне на апаратурата и условията за регистрация на вибрационни спектри, ЯМР спектри и атомносектралната апаратура за определяне на съдържанието на Au, Cu и S в металните комплекси. След подробно и онагледено с фигури и таблици представяне на резултатите от сектралните отнасяния, те са обобщени коректно и систематично от докторант Стоицов.

7. Приноси и значимост на разработката за науката и практиката

Приносите от изследванията имат както научен, така и научно приложен характер. Тези приноси по същество са обогатяване на научните знания с напълно отнесени ЯМР и частично отнесени вибрационни данни за различни класове органични съединения; коригиране на грешки при предходно публикувани и отнесени ЯМР данни за четири от органичните структури, включени в дисертацията; обогатяване на базата данни NMRShiftDB със структурите на флуоренилспирохидантоините и нафтопираноните и с една част от отнесените за тях ^1H и ^{13}C ЯМР данни.

8. Преценка на публикациите по дисертационния труд

Както беше споменато по-горе дисертационният труд включва общо 4 публикации: една е публикувана в специализирано международно списание *Applied Science* с IF = 2.5 за 2024 г. (Q1), една в *Crystals* с IF = 2.4 за 2024 г. (Q2), една в *Molbank* с IF = 0.4 за 2024 г. (Q4) и една в *Bulgarian Chemical Communications* с SJR = 0.148 за 2024 г. (Q4). Резултатите от дисертационния труд са докладвани и на един научен форум.

Докторант Стоицов е първи автор в две от публикациите и втори автор в останалите две публикации. Прави впечатление, че в две от публикациите той е и автор за кореспонденция, което означава, че обучението на докторанта е протекло до край: от научната работа, през анализ и описване на резултатите до оформянето и публикуването в научни списания.

9. Лично участие на докторанта

Оценката ми за личното участие на докторанта в проведеното дисертационно изследване се базира само върху съдържанието на дисертацията и публикациите по нея. Начинът по който е написано въведението и литературния обзор на дисертационния труд показва, че той е запознат много добре с наличната литература, което и е помогнало да се планира ясно и точно научните търсения и да избере методики и подходи, позволяващи реализиране на целите на дисертационния труд. Прочита на дисертацията ме убеждава в задълбоченото познаване на разработваните проблеми. Дискутираното подкреждане на авторите и факта, че той е автор за

кореспонденция в две от публикациите не оставя в мен съмнения за неговото лично участие на всеки етап от изследванията и публикуването на резултатите.

10. Автореферат

Авторефератът е оформен съгласно общоприетите изисквания и отразява точно основните научни приноси на дисертационния труд.

11. Критични забележки и препоръки

По дисертацията докторант Стоицов имам две критични бележки.

Първата е свързана с твърдението: „възможно е да се срещнат NOESY (дори и ROESY) кръстосани сигнали в EXSY спектрите, които да се тълкуват погрешно като EXSY кръстосани сигнали“. Може ли докторантът да даде такъв пример и да обясни разликата между NOESY и ROESY спектри?

Втората е свързана с предполагаемите структури на медните и златни комплекси. Възможно ли е да имаме обмен между няколко форми? Или структури с няколко метала и мостово свързване? За мен малко вероятно изглежда координирането към два далечно разположени в пространството кислородни атоми във фиг. 3 на статията в applied sciences.

Препоръките ми се отнасят основно до представянето на резултатите. Защо не са представени графично корелацията между експериментални и предсказани химични отмествания заедно със статистическите показатели на корелацията? Би било добре да се представят визуално експериментални и симулирани спектри. На 2-3 места в текста е използван термина пулс вместо импулс.

Горните бележки и препоръки не развалят много доброто впечатление от научната работата на кандидата.

12. Лични впечатления

Не познавам докторант Стоицов и моите впечатления за него са само от представените документи по конкурса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд съдържа научни и научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и изследването отговаря 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“.

Дисертационният труд показва, че докторант Димитър Генчев Стоицов притежава задълбочени теоретични знания и професионални умения по научната специалност „Аналитична химия и компютърна химия“ и демонстрира качества и умения за провеждане на изследвания с получаване на оригинални научни приноси. Въпреки наличието на някои по-горе коментирани незначителни бележки по дисертационния труд и автореферата, убедено давам своята положителна оценка на проведеното изследване, постигнатите резултати и приносите, 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“; с професионално направление: 4.2. „Химически науки (Аналитична химия)“ .

29.09.2025 г.

Рецензент:

(проф. д-р Николай Георгиев Василев)