

СТАНОВИЩЕ

от д-р Пламен Ангелов Ангелов, доцент в ПУ „Паисий Хилендарски“

на дисертационен труд за присъждане 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: 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:

Проф. дхн Пламен Николов Пенчев – ПУ “Паисий Хилендарски”

Доц. д-р Марин Нейков Маринов – Аграрен Университет - Пловдив

1. Общо представяне на процедурата и докторанта

Със Заповед № РД-22-1706 от 21.07.2025 г. на Ректора на ПУ „Паисий Хилендарски“ съм определен за член на научното жури в 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 ко-ординационни съединения“ за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2 Химични науки, докторска програма “Аналитична химия“. Автор на дисер-тационния труд е Димитър Генчев Стоицов – докторант в редовна форма на обучение към катедра „Аналитична химия и компютърна химия“. Представеният от Димитър Генчев Стоицов комплект материали е в пълно съответствие с изискванията на ЗРАСРБ и правилника за неговото прилагане, както и с правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ПУ „Паисий Хилендарски“.

2. Актуалност на тематиката

Представеният ми за оценка дисертационен труд е в областта на структурния органичен анализ, с приложение основно на спектроскопия на ядрения магнитен резонанс. С по-малко значение в дисертационния труд са методите на вибрационната (ИЧ) спектроскопия. Тематиката е с непреходна актуалност, предвид практически неизчерпаемите структурно-аналитични задачи поставяни от съвременната синтетична органична химия, както и от химията на природните съединения.

3. Познаване на проблема

Авторът на дисертационния труд е показал добро познаване на проблематиката в избраната изследователска област. Свидетелство за това е литературния обзор, който се простира на 32 страници и обхваща 157 източника. Разгледани са основополагащите принципи на ЯМР спектроскопията, както и най-важните едномерни и 2D корелационни методи. Предоставена е и кратка информация за значението и приложението на класовете органични съединения в които попадат анализираните от автора вещества.

4. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Дисертационният труд е с общ обем от 144 страници. След кратко въведение и описание на целите и задачите е изложен стегнат и добре организиран литературен обзор върху основните принципи на ЯМР спектроскопията и различните ЯМР техники. В литературния обзор са разгледани класовете органични съединения в които попадат анализираните от автора вещества, като са цитирани източници относно методи за получаване, приложение и аналитични проблеми. Включена е и информация за някои полезни програмни продукти, използвани в потвърждаването и разкриването на органични структури. Като самостоятелен втори раздел са представени използваните материали и методи. Резултатите от собствените изследвания на докторанта са добре организирани и представени в третия раздел от дисертацията. Извършено е пълно отнасяне на ЯМР спектрални данни за 23 органични съединения, както и частично отнасяне вибрационни данни за тези съединения. Корижирани са грешки при предходно публикувани и отнесени ЯМР данни за четири от тези съединения. Изследваните съединения включват флуоренилспирохидантоини, нафтопиранони, 2,4-дитиоурацил и 2-тиоурацил, метални комплекси на Cu(II) и Au(III) с 2,4-дитиоурацил, диспироимидазолидинови производни, антраниламидни производни и бензо[d]изохинолиндиони.

Като приложения, отделно от дисертацията, са представени изображения на всички ЯМР спектри в PDF формат.

5. Преценка на публикациите и личния принос на докторанта

Към момента, получените в дисертацията резултати са представени в четири научни публикации. От тях три са индексирани в базите данни Web of Science и Scopus, а една – само в Scopus. Две от публикациите са в списания с кuartил Q2 – Applied Sciences (IF = 2.5) и Crystals (IF = 2.4), а други две са в издания с кuartил Q4 – Molbank (IF = 0.4) и Bulgarian Chemical Communications (SJR Q4). Някои от резултатите в дисертацията предстои да бъдат публикувани на по-късен етап.

В две от публикуваните до момента статии Димитър Стоицов е първи автор, а в останалите две е втори, което е добър атестат за личния му принос.

6. Автореферат

Авторефератът напълно съответства на дисертацията, като представя резултатите и дискусията от дисертационния труд в съкратен вид. Направените изводи и обобщения са в пълно съгласие с описаните в дисертацията резултати.

7. Критични бележки, препоръки и въпроси.

Препоръчвам първичните данни от ЯМР измерванията да бъдат споделени в публично достъпно хранилище за данни (например Zenodo), тъй като приложените спектрални изображения не са подходящи за внимателен анализ.

В литературния обзор е посочено хибридно състояние на С-атомите като фактор определящ химичното отместване, но като причина е посочен само различния s-характер на хибридните орбитали, докато значително по-силно влияние тук има магнитната анизотропия. В този контекст уместно би било да се посочи връзката между s-характера на хибридната орбитала и съответната $^1J_{CH}$ константа.

В раздела със собствени изследвания при спектралните отнасяния не е указан произходът на анализирания молекули. Посочен е само авторът, извършил синтеза, без синтетична схема или цитат към оригиналната работа.

На места неправилно е ползван термина химична еквивалентност, вместо изохронност (стр. 83, стр. 85).

Предложената на Фиг. 18 (стр. 96) тавтомерия би се отразила на повече сигнали в 1H и ^{13}C спектрите на съединение XIV, а не само на дискутирания сигнал, отнесен за позиция vi. Вероятно става дума за артефакт от лоша фазова корекция, а не за втора съседна HSQC корелация с обратен знак. Дадените в приложението ^{13}C и 2D корелационни спектри на XIV изглежда не са подравнени по вътрешен стандарт и хаосът в леките отклонения на δ стойностите се е пренесъл в дикусията на стр. 97.

Към докторанта имам следните въпроси:

1. При отнасянето на спектрите на диспироимидазолидиновите производни XI – XIV, за СН група от винилов тип (позиция vi по възприетата номерация) са отнесени сигнали с нетипично малко отместване: 2.40 – 2.72 ppm за 1H и 25.24 – 29.17 ppm за ^{13}C . Разглеждани ли са други възможности за предложените структури?

2. Изключват ли възможността N и S атомите в бензотиазепиновия пръстен на съединения XII и XIII да са с разменени места?

Направените критични бележки не развалят общото добро впечатление от работата.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд съдържа научни и научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и отговарят на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и съответния Правилник на ПУ. Представените материали и резултати покриват специфичните изисквания за придобиване на научната и образователна степен „доктор” в областта на аналитичната химия.

Дисертационният труд показва, че докторантът Димитър Генчев Стоицов притежава задълбочени теоретични знания и професионални умения, като демонстрира качества и умения за самостоятелно провеждане на научно изследване.

Поради гореизложеното, убедено давам своята **положителна оценка** за проведеното изследване, представено от дисертационния труд и предлагам на

почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен ‘доктор’ на Димитър Генчев Стоицов в област на висше образование: „Природни науки, математика и информатика”, професионално направление 4.2. „Химически науки”, Научна специалност „Аналитична химия”.

01.10.2025 г.

Изготвил становището:

Доц. д-р Пламен Ангелов