

РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационен труд

„Приложение на спектрални методи

за калибриране на многокомпонентни лекарствени смеси ”

на **Георги Христов Гергов**

за присъждане на образователната и научна степен **„Доктор”**

по научна специалност **„Аналитична химия”**,

професионално направление 4.2. **„Химични науки”**

научна област **„Природни науки, математика и информатика”**

от проф. д-р **Стефан Цаковски**

Факултет по химия и фармация при СУ „Св. Климент Охридски“

Представеният ми за рецензиране дисертационен труд представя разработени многовариационни методи за калибриране на многокомпонентни лекарствени смеси. Актуалността на разработката е безспорна, като се има предвид многокомпонентния състав на лекарствените продукти и строгите изисквания към контрола във фармацевтичното производство. Представените в дисертационния труд подходи предлагат ефективни решения за надежден контрол на производството на фармацевтични продукти. Трябва да отбележа, че това е първият дисертационен труд в областта на многовариационното калибриране в България.

Структурата на дисертацията е логична. **Литературният обзор** показва добро разбиране на същността на проблема от теоретична и приложна гледна точка. Кратко и ясно са описани графичните и многовариационните статистически методи за калибриране на многокомпонентни смеси. Като изключително полезен намирам прегледа на експерименталните планове с оглед провеждането на рационален набор от експерименти. Така, логично докторантът стига до най-новите подходи в многовариационното калибриране, каквито са методите, базирани на нетния аналитичен сигнал и на разделянето на спектрални криви.

В резултат на литературния обзор ясно е формулиран изследователския проблем и подходящите методи за неговото решаване. **Научната цел** е представена конкретно, а **етапите на изследването** са дадени като отделни, логично формулирани задачи.

В „**Експериментална част и методи на изследване**” са представени изследванията върху многокомпонентните лекарствени смеси, а именно:

- офталмологична суспензия на ацетофтатат, съдържаща пилокарпин;
- доксиламин и пиридоксин;
- парацетамол, пропифеназон и кофеин.

Към всяка от изследваните системи са прилагани по няколко подхода за многовариационно калибриране в зависимост от целите на конкретното изследване. Считам за уместен начина, по който са представени изследванията, но изложението би спечелило ако всяка от многокомпонентните системи бе описана по идентичен начин. Като важни от аналитична гледна точка бих посочил критичния анализ на използваните методи за многовариационно калибриране. Тук бих отбелязал зависимостта на MCR ALS подхода от избрания експериментален план, изборът на спектрален регион за калибриране, извеждането на основните аналитични характеристики и др.

Получените резултати са изчерпателно и коректно описани. Моделите са дискутирани задълбочено и аналитично. Дисертантът е подходил с необходимата прецизност при валидирането на методите за многовариационно калибриране. При дискусията на резултатите прави впечатление сравнителния анализ на две двойки групи методи с оглед приложението им към конкретни системи:

- графични и хеометрични модели за двукомпонентна система;
- NAS базирани и PLS методи за трикомпонентна система.

Намирам, че изводите и препоръките от този сравнителен анализ имат отношение както към приложения аспект на многовариационното калибриране, така и към проблеми, които биха били обект на следващи изследвания.

Цялостната дискусия на получените резултати надхвърля задължителния сравнителен анализ и компетентно изтъква ползите и ограниченията при използването на различните многовариационни методи за калибриране. Това показва компетентност, и мотивация, без които едно изследване е немислимо.

В резултат на проведените изследвания докторантът е определил **седем приноса**, които биха могли да бъдат обобщени както следва:

1. Приложение на графични и хемометрични методи за многовариационно калибриране на лекарствени смеси и тяхното сравнение.
2. Разработване и реализиране на програмни кодове и блок-схема на някои от методите за многовариационно калибриране.

Имам кратък коментар, който е продължение на дискусиата по време на предварителната защита на дисертационния труд пред катедрата по Аналитична химия. Бих препоръчал на докторанта в бъдещите си изследвания да изследва и сравни:

- възможностите на подходи в PLS методите за определяне на значимостта на променливи (дължини на вълните) като VIP и Selectivity ratio;
- областите на приложение (applicability domain) на различните подходи за калибриране.

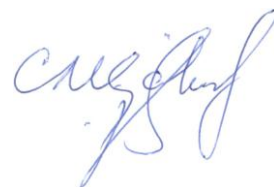
Резултатите, свързани с дисертацията са включени в пет публикации, от които две са изпратени за печат. От трите публикувани изследвания, две са в списание с импакт фактор. Правейки уговорката, че разделянето на приносите в едно научно изследване е в голяма степен условно, предвид все по-засилващия се екипен характер на работа, бих искал докторантът да коментира своите основни приноси в публикуваните изследвания.

Като част от публикационната активност и популяризацията на проведените изследвания следва да се отбележи участието на докторанта в два научни форума.

Накрая ще обърна внимание на техническото оформление на дисертацията. Разбира се има още технически и стилистични детайли за доизглаждане. Част от тях отдавам на липсата на наложили се български термини в областта на многовариационното калибриране. Независимо от това, като цяло бих казал, че дисертацията е написана ясно и методично.

Въз основа на направения анализ мога да заключа, че предоставеният ми за рецензиране дисертационен труд представлява компетентно, задълбочено проведено научно изследване. На тази база убедено давам положителната си оценка и препоръчвам на почитаемото Научно жури да присъди на Георги Христов Гергов образователната и научна степен "Доктор".

София, 18.08.2017г.



проф. Ст. Цаковски