

Становище

от проф. д-р Николай Георгиев Василев,
Институт по органична химия с Център по фитохимия, БАН
1113 София, ул. Акад. Г. Бончев, бл. 9

относно 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 (Органична химия).

На тема: „Квантовохимично и експериментално изследване на реакционните механизми при кумарини“, предоставен за придобиване на образователната и научна степен „доктор”

Автор: Кристина Боянова Симеонова

Научни ръководители: проф. д-р Петко Петков и проф. д-р Росица Николова

Форма на докторантурата: редовен докторант в катедра „Органична химия и фармакогнозия“ към ФХФ на СУ „Св. Климент Охридски“.

1. Общо представяне на кандидата и процедурата

Кристина Симеонова е придобила образователната степен Магистър по химия, специалност „Съвременни методи за синтез и анализ на органични съединения“ в СУ „Св. Климент Охридски” през 2020 г. В периода от 01.03.2021г. до 01.03.2024 г. е редовен докторант в катедра „Органична химия и фармакогнозия“ към ФХФ на СУ „Св. Климент Охридски“. Понастоящем кандидатката работи като асистент в същата катедра.

Представеният ми комплект от материали на електронен носител включва всички необходими за процедурата документи от административен и научен характер. Тези документи са в съответствие с Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности на СУ „Св. Климент Охридски“ и с ЗРАСРБ.

2. Актуалност на тематиката

Актуалността на дисертацията се определя от актуалността на обектите на изследване: кумарините и техните дихидродимери. Те намират широко приложение в различни области – от използването им като лазерни устройства до приложението им като биологично активни вещества – антибиотици, антидепресанти, противотуморни

средства, препарати за образна диагностика, антикоагуланти и други. Затова изучаването както експериментално, така и теоретично на механизма на формиране на хомодимери на 3-ацетилкумарина и неговите производни е определено актуална тематика.

3. Познание на проблема

Разработката на общата част и литературния разбор на дисертационния труд ми направиха много добро впечатление. В литературния обзор систематично са представени както теоретичните квантовохимичните изследвания на структурата и свойствата на кумарин и неговите производни, така и експерименталните методи за получаване на дихидродимери на кумарини. Освен това е представена същността на теорията на функционала на плътността и неговото приложение за моделиране на органични реакции, изчисляване на атомни заряди и предсказване на спектрални данни. Въз основа на това представяне е обоснован и използваният изчислителен протокол.

Кандидатката демонстрира много-добро познание на научните проблеми, с които тя трябва да се справи в своето изследване. Дисертационния труд е написан на 207 страници, като литературният обзор обхваща 101 страници. Литературната справка съдържа 71 цитата, от които 62 се отнасят за литературния обзор.

4. Методика на изследването

Кандидатката е формулирала по следния начин целта на работата и по дисертацията: чрез експериментални и квантовохимични изследвания, да се изучи по-задълбочено реакцията на хомодимеризация на 3-ацетилкумарин, механизмът на протичане и обхвата ѝ, в зависимост от заместителите в кумариновата система. За осъществяването на поставената цел, са проведени както експериментално така и теоретично изследване на механизма на хомодимеризация на 3-ацетилкумарин и негови производни.

Поставените задачи са адекватни за изпълнение на целта на дисертацията. Избраните експериментални методики и изчислителен протокол, позволяват постигането на поставената цел и получаване на адекватен отговор на поставените задачи.

5. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Изследвани са активирация ефект на разтворителя, възможните радикалов или йонен механизъм на реакцията. Изследвано е също влиянието на заместители в ароматното ядро на 3-ацетилкумарина и вида на металните соли върху реакционния механизъм.

В резултат на тези систематични и продължителни експериментални и квантово-химични изчисления се стига до извода, че реакцията на хомодимеризация зависи от вида на използваният метал и разтворител, като най-добри добиви на хомодимерните продукти се наблюдават при използване на Zn, хлороцетен анхидрид, в среда от THF/Et₂O, при ултразвуково облъчване и температура 40°C. Друг важен извод е че, реакцията на хомодимеризация най-вероятно протича по радикалов механизъм.

След подробно и онагледено с достатъчно фигури и таблици представяне на резултатите от научните изследвания, те са обобщени коректно и систематично от докторант Симеонова. Приносите от изследванията имат основно научен характер, а получените резултати могат да се отнесат към обогатяване на научната област с нови знания.

6. Преценка на публикациите и личния принос на докторанта

Дисертационният труд включва общо 2 научни публикации в реномираното международно списание *Molecules* (Q1) с импакт фактор 3.2 за 2023 г. Резултатите от дисертационния труд са докладвани и на 6 научни форума.

Оценката ми за личното участие на докторантката в проведеното дисертационно изследване се базира само върху съдържанието на дисертацията. Начинът по който е написано въведението и литературния обзор на дисертационния труд показва, че тя е запозната много добре с наличната литература, което и е помогнало да 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.

7. Автореферат

Авторефератът достатъчно пълно и точно отразява най-важните експериментални резултати и научни хипотези от дисертационния труд.

8. Становища, бележки и препоръки

Не съм намерил грешки, неточности или пропуски в представения дисертационен труд и неговия автореферат. Вероятно технически грешки са използваните на стр. 6: „хомодомери“ и „хомодмеризация“, на стр. 29 „коефициени“. Нямам лични впечатления от докторантката и впечатленията са ми само от представените материали. Кристина Симеонова е извършила значителна по обем експериментална и теоретична работа, правилно са отнесени спектралните данни и е изложила коректно получените резултати като ги е дискутирала компетентно. Усвоила е съвременни методи за органичен синтез, спектрален анализ и теоретично моделиране

на сложни органични структури и реакции. Работата по дисертационния труд я характеризира като много добре подготвен млад специалист и изследовател. Следователно образователна цел на докторантурата без съмнение е успешно изпълнена. За мен обаче остава загадка защо не са изследвани и дискутирани теоретично ротационните изомери около връзката C4-C4' на кумариновите димери. От възможни три ротационни изомера един е предпочетен и е отнесен на база на експериментални ЯМР изследвания. Ако бяха моделирани квантово-химично трите изомера от тяхната стабилност може да се изчисли теоретичната населеност на отделните изомери и да се сравни с експерименталните ЯМР данни. Това би подпомогнало отнасянето на отделните изомери. Евентуалното пресмятане на химичните отмествания в отделните изомери, както и някои константи на спин-спиново взаимодействие също биха могли да бъдат от полза за анализа на експерименталните ЯМР данни.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд на Кристина Симеонова съдържа оригинални научни резултати, които представляват оригинален принос в науката. Получените научни резултати отговарят и надхвърлят изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности на СУ „Св. Климент Охридски“.

Дисертационният труд показва, че докторант Кристина Симеонова притежава задълбочени знания и професионални умения по научната специалност „Органична химия“ и демонстрира качества и умения за провеждане на изследвания с получаване на оригинални научни приноси. Затова аз убедено давам своята положителна оценка на представения дисертационен труд и предлагам на почитаемото научно жури да присъди на Кристина Симеонова образователната и научна степен „доктор“.

София, 15.05.2025 г.

Подпис:

/проф. д-р Н. Василев/