

## СТАНОВИЩЕ

От доц. д-р Меглена Илиева Къндинска-Василева – Факултет по химия и фармация,  
СУ „Св. Кл. Охридски“

*Относно:* Дисертационен труд за придобиване на образователна и научна степен „Доктор“ по професионално направление 4.2. Химически науки (Органична химия)

*Тема на дисертационния труд:* „Квантовохимично и експериментално изследване на реакционните механизми при кумарини“

*Автор на дисертационния труд:* **Кристина Боянова Симеонова** – редовен докторант към Катедра по органична химия и фармакогнозия, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“

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

Становището е изготвено съгласно Заповед РД 38-153/17.03.2025 г. на Ректора на СУ „Св. Климент Охридски“ и решенията от заседание на Научно жури, проведено на 07.04.2025 г.

Представеният ми за становище дисертационен труд обхваща задълбочени синтетични и квантовохимични изследвания, свързани с изясняване механизма на реакцията на хомодимеризация на 3-заместени кумарини, с изучаване влиянието на реакционните условия върху хода ѝ и с оценка на стабилността на възможни интермедиати.

Поставените изследователски задачи са в съответствие с основната цел на дисертационния труд.

Дисертацията е написана на 207 страници и включва: Съдържание – 2 стр., Увод – 2 стр., Литературен обзор – 95 стр., Изчислителен протокол – 1 стр., Резултати и обсъждане – 89 стр., Експериментална част – 10 стр., Изводи – 2 стр., Литература – 4 стр. с цитирани 71 източника.

По дисертационния труд са публикувани 2 научни съобщения в списание, реферирано и индексирано в световноизвестни бази данни с научна информация. И двете публикации са с импакт фактор (IF), като попадат в категория Q1, с което минималните национални изисквания са покрити и дори надхвърлени.

Част от постигнатите от дисертанта резултати са представени с три устни и с три постерни доклада на два национални и четири международни научни форума.

Литературният обзор, направен от докторанта, е изцяло в съответствие с тематиката на дисертационния труд. Състои от три части, в които последователно са разгледани квантовохимични изследвания, касаещи структурата и свойствата на кумаринови производни. Приведени са литературни данни за възможни реакционни пътища за осъществяване на реакции на димеризация на кумарини. Подробно са описани теоретичните подходи, използвани за провеждане на изследванията в дисертационния труд.

Литературният преглед е написан компетентно. Описаните синтетични и теоретични методи са добре онагледени със съответните схеми, фигури и таблици. Анализът на включената в обзора информация аргументира напълно целта на дисертацията и несъмнено

е насочил докторанта към формулировката на конкретните задачи за успешното ѝ реализиране. Бил е полезна основа за реализиране на собствените му научни изследвания.

С разработването на дисертационния си труд Кристина Симеонова продължава и развива тематика, представляваща интерес за Лабораторията по органичен синтез и ЯМР спектроскопия, като задълбочава и разширява изучаването на реакцията на хомодимеризация на 3-заместени кумарини, нейния механизъм и обхват с вариране на структурата на използваните изходни съединения, както и на приложените реакционни условия (избор и съотношение на метал/метална сол, избор на разтворител или комбинация от разтворители).

Проведените експерименти следват логиката на добре планирано обстойно изследване и са описани систематизирано. При обсъждане на синтетичните си изследвания и при коментара на наблюдаваните резултати докторантът демонстрира задълбочени познания в областта на органичния синтез и хетероциклената химия, довели до стойностни, правдоподобни заключения и до необходимостта от провеждането на допълнителни квантовохимични изчисления с цел изясняване на влиянието на разнообразието от фактори върху хода на целевата реакция.

В резултат от постигнатото от докторанта, могат да се излявят следните приноси от дисертационния му труд:

- 1) Установено е, че реакцията на хомодимеризация на 3-заместени кумарини се влияе съществено от вида на използвания метал, метална сол и са намерени реакционни условия, осигуряващи най-високи добиви на хомодимерните продукти.
- 2) В следствие на проведените експериментални и теоретични изследвания е установено, че хомодимеризацията най-вероятно протича по радикалов механизъм, поради необходимостта от наличие на метал в реакционната смес, стабилизиращ получаващия се в хода на реакцията радикал.
- 3) С помощта на квантовохимични изчисления е изяснена възможността за формиране на радикалови и йонни интермедиати с различни метали – Zn и Cu.
- 4) Направена е теоретична оценка на влиянието на солватиращата способност на използваните разтворители върху хода на целевата реакция и тя е в съответствие с експерименталните данни.
- 5) Установено е, че наличието на заместители в бензопирановия пръстен влияе на процеса на хомодимеризация, като намиращите се в позиция 7 са от съществено значение за формирането на C4-C4'-връзката. Квантовохимичните изчисления доказват, че силни електронодонорни групи на 7-мо място дезактивират кумариновата система и дестабилизируют формирането на радикаловите интермедиати, което обяснява възпрепятстването на реакцията на хомодимеризация, наблюдавано и експериментално. Изводът от синтетичните изследвания, че заместители в позиции 6 и 8 на бензопирановата пръстенна система не са от значение за формирането на радикалов интермедиат, е потвърден и на теория.

- б) Потвърдено е, че направените изводи от проведените изследвания със заместени 3-ацетилкумарини важат и за други 3-заместени кумаринови производни – 3-фосфонокумарин и етил кумарин-3-карбоксилат.

**Заключение:** Дисертацията на Кристина Боянова Симеонова напълно отговаря на изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за прилагането му, Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“ за професионално направление 4.2. Химически науки. Представени са оригинални научни резултати, обемът и качеството на труда отговарят на общоприетите стандарти. С него докторантът убеждава в последователността си при постигането на конкретно поставени цели, в компетентността си при разрешаване на научни проблеми и при интерпретацията на научни данни. Дисертантът притежава необходимите знания, опит и качества за развиване на самостоятелна научно-изследователска дейност.

По време на разработване на дисертационния си труд и като асистент към Катедрата по органична химия и фармакогнозия Кристина Симеонова се отличи със сериозното си и отговорно отношение към научно-изследователската и преподавателската работа. Заслужава да се отбележат заслугите ѝ за приобщаване на студентите към факултетската среда, към академичното съсловие и привличането им към сферата на научните изследвания – резултат от активната ѝ дейност като член на Студентския съвет към ФХФ и като член на организационния комитет на ежегодната Национална конференция по химия за студенти и докторанти.

Въз основа на всичко гореспоменато, давам **положителна си оценка** на представения ми за становище дисертационен труд и препоръчвам на уважаемите членове на Научното жури да гласуват за присъждане на образователната и научна степен „Доктор“ по област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, научно направление 4.2. Химически науки (Органична химия) на Кристина Боянова Симеонова.

Дата: 21.05.2025 г.

Член на Научното жури:

/доц. д-р М. Къндинска-Василева/