

СТАНОВИЩЕ

За научните приноси на доц. дхн Людмил Манолов Антонов

Единствен кандидат в конкурса, обявен от:

Институт по Органична химия с Център по фитохимия при БАН, София:
за **професор по 4.2.** направление **Химически науки,**

01.05.04. *Аналитична химия* – **Физична органична и органична аналитична химия**

За нуждите на лаборатория Физична органична и изчислителна химия

От: доц. д-р Галина Георгиева Генчева, Катедра Аналитична химия,
Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Кл. Охридски”

Доц. дхн Л. Антонов е представил за участие в конкурса 62 публикации в международни списания и 11 други публикации от Международни конференции (5), публикувани в Годишника на Софийски университет, Химически факултет (4) и Авторефератите за присъждане на научната степен „кхн” и „дхн”. Според библиографската база данни Scopus до момента са регистрирани 904 цитата (изключени са самоцитиранията от всички съавтори), а определената стойност за h-индекса е 14. Съгласно изискванията на Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, чл. 60, ал 3., от списъка на научните публикации, 18, а именно **[45-62]** не са били включвани в предходни конкурси за присъждане на научните степени „дхн” и „кхн”, както и в конкурси за заемане на академичната длъжност „доцент” или „ст.н.с. Пост.”. Тези статии са в международни списания с импакт фактор, публикувани са след 2006 год. и само по тях до момента са забелязани 64 цитата без да включвам общия брой цитирания за този период. Представен е списък с 50 участия в международни и национални научни форуми с постери и доклади, в съавторство с международни и български учени. Внимание заслужава и големият списък с участия в научни международни (8) и национални (9) проекти, както и данните за научно-приложна, експертна и консултантска дейност. В тази област на научни активи на кандидата, трябва да се подчертае създаването на софтуерните продукти SBSF (step-by-step filter) и FiNAL (Fishing Net Algorithm), както и осигуряването на поддръжка и обучение за използването им.

Научите приноси, в цялостната научно-изследвателската работа на доц. Антонов могат да се обобщят както следва:

- Разработени са алгоритми за компютърно прилагане на математически методи **[3,23,24,30,37,38,50]** (Метод на Levenberg или комбиниран метод Levenberg–Marquardt с апроксимиране на спектралната крива по линеен или нелинеен метод на най-малките квадрати) за разделяне на припокриващи се ивици в електронно-абсорбционните (UV-Vis) спектри, регистрирани линейно по дължината на вълната (λ). За оценка на броя на припокриващите се ивици са изведени възможностите на диференциалните спектри от различна полиномиална степен с прилагане на специални процедури (филтри) за изглаждане на спектрите **[4,14,15,23,31]**. Внимание заслужава предложеният метод с променлива стъпка по дължина на вълната λ или “step-by-step filter”, който служи за изглаждане и диференциране на спектралната крива и за разлика от класическите методи (напр. Savitzky-Golay filter) при прилагането му не се губи спектрална информация. Математически подход е използван и при анализ на спектрални данни от двуфотонна абсорбция **[38]**.
- Разработените методи за интерпретиране на UV-Vis спектри намират приложение при:
 - изследване на копланарност на спрегнати системи **[7]**
 - изследване на дву- и многокомпонентни системи с ненапълно неизвестни индивидуални абсорбционни спектри **[18]**. В тази връзка е разработен и програмен продукт FiNAL, който се разпространява през интернет (Fishing Net Algorithm). Изучавани са:
 1. Тавтомерни равновесия при азоаптоли и шифови бази – симулиране на индивидуална спектрална крива за чиста тавтомерна форма; определяне на равновесни константи на тавтомерни равновесия и % състав на отделните тавтомерни форми, изследване на влиянието на заместителите в молекулната структура на хромофора,

реакционните условия, както и процесите на депротониране и комплексообразуване върху тавтомерното равновесие и др. [6,10,12,13,27,28,32,35,41,45,51].

2. Процеси на комплексообразуване (за сравнително нестабилни комплекси) и равновесия, установяващи се в хода на комплексообразуването между свободен лиганд и комплексен вид [5,9,11,17,19,25].

3. Процеси на агрегиране [21,26,58] и пренос на протон [26,36], паралелно с установяване на тавтомерно равновесие;

4. Амониево-азониевата тавтомерия при amino-заместени азосъединения [1,17,20,44]. За серия от N,N-диалкиламиноазобензени са определени освен равновесни константи за тавтомерни равновесия и протолизни константи на отделните тавтомери;

➤ Развитие на идеята за приложение на тавтомерните процеси при предаване на информацията и използване на тавтомерни системи като молекулни превключватели [53-55,57,61]. Разработена е сензорна система на основата на 1-фенилазо-4-нафтол и аза-15-краун-5 и са изучени влиянието на молекулната структура, комплексообразуването и протонирането върху изместване на равновесието.

➤ Изучавани са двуфотонни абсорбционни спектри на тавтомерни системи с нелинейните оптични свойства [39, 44,47,49,56].

➤ Теоретично са изследвани с методите на квантовата химия тавтомерни равновесия [42,45,51,60], молекулна структура и свойства [43,48,52,57,58,62].

Научните изследвания в областта на математически анализ на спектралните линии, които подчертавам имат огромно експериментално приложение при изучаване на равновесия с хромофорни системи (каквито са тавтомерните равновесия на изучаваните класове съединения), поставят въпроса, свързан с математическата точност на резултата за производните при численото диференциране на спектрални линии, регистрирани със сравнително неголям брой точки. Какъв е минималният брой точки, описващи експериментално спектралната линия в UV-Vis спектъра по вълнови числа и размерът на стъпката, за да бъде грешката от прекъсване пренебрежима? Какви биха били стойностите на тези параметри при получаване на коректни диференциални спектри в близката инфрачервена област?

Отбелязаните по-горе области на научни изследвания на доц. Антонов не покриват цялостната му научно-изследователска дейност. В работата си той се изявява като задълбочен изследовател и мотивиран учен. За това говори и големият брой цитирания. Изискванията на ЗРАСРБ и съответните Правилници за неговото приложение са спазени. Това ми дава основание да препоръчам на членовете на Научното жури да присъди на кандидата доц. Людмил Антонов научното звание „Професор”.

11.05.13

Рецензент:.....
/Г. Генчева/