

СТАНОВИЩЕ

относно дисертационния труд на Ангелина Делчева Попова на тема „Биологично активни вещества, съдържащи сулфонамидна група: експериментални ИЧ и квантовохимични изследвания”, представен за придобиване на образователната и научна степен „доктор” по научна специалност: Органична химия (шифър 01.05.03) от професионално направление: 4.2. Химически науки

от доц. д-р Евелина Велчева, Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия, БАН

Изследванията на докторант Ангелина Попова са върху биологично активни съединения с пряка практическа приложимост - във фармацевтиката и хранителната промишленост. Целта на дисертацията е изясняване на вибрационните и структурни характеристики (пространствен и електронен строеж, стабилност и др.) на неутралните молекули и съответните азаниони на сулфаниламид, сулфацетамид, сулфагуанидин и ацесулфам.

При изследванията е приложен комбиниран подход, основан на синтез (включително на изотопните аналози ^{15}N и D), измерване на спектри и провеждане на квантовохимични изчисления. Получено е добро съответствие между експерименталните и пресметнатите вибрационни честоти, включително изотопните честотни отмествания на ИЧ ивици. Въз основа на получените резултати са отнесени вибрационните ивици на изследваните частици и коригирани неточности в предишни отнасяния.

Докторантът Ангелина Попова е провела теоретичен конформационен анализ на изследваните съединения и е определила най-изгодните техни конформации. При пресмятане на тавтомерните форми на ацесулфам е установила, че в газова фаза е по-стабилна лактам формата, докато в разтворител ДМСО се стабилизира предпочитано лактим формата. Попова е регистрирала ИЧ спектри на ацесулфам в твърдо състояние и в различни разтворители, които потвърждават теоретичните предсказания, че в полярния апротен разтворител ДМСО преобладава лактим тавтомера, а в неполярни разтворители лактам тавтомера.

По продължението на традиционната за лаборатория „СОА” тематика от докторант Попова са изследвани промените в характеристиките на ИЧ спектри, породени от превръщането на неутралните органични молекули в анионни производни. В съответствие между данните от теоретичните пресмятания и експериментално измерените ИЧ характеристики на изследваните сулфонамидни съединения е установено, че превръщането на неутралните молекули в азаниони води до силно понижение (от 66 до 140 cm^{-1}) на валентните честоти на сулфоновите групи. Изменения претърпяват и ивиците на присъстващите в изследваните частици други групи: валентните честоти на карбонилните групи се понижават от 62 до 124 cm^{-1} и т.н. Структурните промени, предизвикани от превръщането на молекулите в азаниони са най-съществени при, или в съседство на анионния център.

В литературата броят на изследванията на вибрационните спектри на органичните йони е с около 2 порядъка по-малък от тези на органичните молекули, като съществена причина за това съотношение са експерименталните затруднения с които обикновено е свързана работата с органични йони. Приносът на г-ца Попова, специално за сулфонамидните аниони, е съществен. Обобщението на всички наши резултати ще ни даде възможност да се определят основните закономерности, свързващи строежа с ИЧ спектри на органични молекули и техните разнообразни анионни производни.

Докторантът Ангелина Попова е представила научните резултати по темата на дисертацията в 5 научни статии. 3 от тях са публикувани в специализирани международни списания като J. Mol. Structure, Int. J. Quant. Chem. и Asian Chem. Lett., а 2 – в специализирани български списания. Публикациите са цитирани общо 9 пъти, което потвърждава актуалността на получените резултати. С част от материалите по тези научни разработки г-ца Попова е участвала в 5 международни и национални конференции. Тя е изпълнила образователната и научна програма за подготовката на докторантите в БАН и е събрала кредити над изисквания минимум.

Личните ми впечатления от работата на докторантката са много добри. Тя е изключително самостоятелна и инициативна, като експериментатор е сръчна и прецизна, бързо усвоява и научно-приложни програмни продукти. Ангелина Попова притежава задълбочени теоретични познания и практически умения и е търсен и желан партньор както от колегите в лабораторията, така и от колеги извън нея. Участвала е в 3 проекта финансирани от Фонд „Научни изследвания“ на МОН и е била научен ръководител на няколко дипломанта от Химическия факултет, които защитиха успешно дипломните си работи.

Заклучение:

Представеният дисертационен труд напълно отговаря на изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и Правилника за развитие на академичния състав на ИОХЦФ-БАН. Дисертантката се е справила отлично с поставените задачи и е получила нови и интересни резултати, като направеният подробен анализ показва, че тя има сериозни и задълбочени познания както по ИЧ спектроскопия, така и в областта на квантовохимичните изчисления. Считам, че докторант Ангелина Попова отговаря на критериите за образователната и научна степен “доктор” и ще гласувам “за” присъждането на тази степен.

София, 5.09.2013 г.



доц. д-р Евелина Велчева