

СТАНОВИЩЕ

от доц. дн Димитър Тодоров Цанков

за дисертационния труд на **Ангелина Делчева Попова** на тема
**“Биологично активни вещества, съдържащи сулфонамидна група:
експериментални ИЧ и квантовохимични изследвания”**, представен за присъждане
на образователната и научна степен **“доктор”**

Предмет на изследването в представения докторантски проект е уточняване на електронния и пространствения строеж на четири представителни органични молекули и техните аниони, съдържащи сулфонамидна група. В тази група влизат: сулфаниламид, сулфацетамид, сулфагуанидин и ацесулфам-К. Всички те притежават доказано биологично активно действие, като първите три от тях се използват като антимикробни и бактерицидни препарати в хуманната и ветеринарната медицина, а калиевата сол на ацесулфама намира приложение като хранителна добавка в сладкарската индустрия. Целта на настоящата дисертация не включва търсенето на конкретна връзка между строеж и биологична активност, което би разширило прекалено обема на изследванията и съществено ще надхвърли изискванията за получаване на исканата научна степен. От друга страна, първоначални изследвания на бактериостатичната активност на сулфонамиди, проведени още през 40-те години на миналия век, предполагат повишена активност на съответните азаниони пред неутралните молекули. Този факт обуславя в достатъчна степен положените усилия за синтез и спектрално охарактеризиране на съответните аниони, за които липсват литературни данни. Тези стойности биха могли да се използват по-късно от други автори при обяснение на този феномен.

Експерименталната работа по дисертацията включва синтез на моделни молекули и техни ^{15}N и деутерирани изотопни аналози, последващо получаване на техните аниони и охарактеризирането им с инфрачервена спектроскопия в твърдо състояние и разтвор. Попова е ползвала и литературни кристалографски данни за неутралните молекули, там, където те са налични. Квантово химичните изчисления за оптимизираната геометрия и силовите полета са проведени с метода на плътностния функционал при използване на достатъчно разширени набори базисни функции.

Получено е добро съответствие между изчислителните резултати и инфрачервените спектри, което повишава доверието в предсказаните стойности за анионите, за които няма експериментални данни. Логиката на зададените въпроси и средствата и методите за търсене на техните отговори разкриват достатъчна степен

на задълбоченост на самото научно изследване. Аргументацията на направените изводи не буди съмнение.

Научните приноси на автора, според мен, имат оригинален елемент и могат да се отнесат към категорията "получаване и доказване на нови факти". Основните резултати от дисертацията са публикувани в 5 научни съобщения, публикувани в наши и международни списания с импакт фактор. Една от работите в *Int J Quant Chem* е цитирана седем пъти от чужди и наши автори. Резултати от този дисертационен труд са докладвани и на пет конференции.

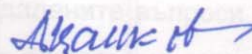
Докторантката демонстрира добро познаване на литературния материал. В дисертационния труд са цитирани 250 заглавия на оригинални работи и монографии, като експериментални и теоретични данни от тях се сравняват и съпоставят със собствени резултати. В хода на изработване на дисертационния труд, Попова активно е усвоила знания и експериментални техники от теорията и практиката на инфрачервената спектроскопия. Работата ѝ се отличава с прецизност и задълбоченост при тълкуване на получените резултати, което ще оформи и стила на бъдещите ѝ научни изследвания.

Основните ми забележки и препоръки засягат оформянето на дисертационния труд. Не е прието в заглавие на дисертация да се използват абривиатури, като „ИЧ“ трябва да се замени с „инфрачервени“. В част IV „Квантово химични изчисления“ няма съответствие между цитираните уравнения и тяхното описание в текста (у-ние 5, стр 36, и у-ние 6, стр 37). На стр 41 е цитиран труд под номер 350, какъвто в изброената литература няма. Неправилно е дефинирана интегралната интензивност като „величина характеризираща силата на наблюдаваните в инфрачервената спектроскопия ивици“ (стр 43). На същата страница по-долу трябва да се замени „отразената“ с „преминалата“ светлина, когато се касае за закона на Беер за светлинна абсорбция. Считаю, че посочените грешки трябва да бъдат отстранени преди дисертацията да бъде представена за публичен достъп в химическата библиотека на БАН.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представеният дисертационен труд е задълбочено изследване на електронния и пространствен строеж на моделна серия сулфонамиди и техни аниони. Обемът и демонстрираното научно ниво отговарят на изискванията за получаване на исканата научна степен. Горейзложеното ми дава основание убедено да препоръчам на уважаемото Научно жури да присъди на Ангелина Делчева Попова образователната и научна степен „доктор“.

04.09.2013


Д. Цанков