

## СТАНОВИЩЕ

по дисертационния труд  
на **Ангелина Делчева Попова**

на тема «Биологично активни вещества, съдържащи сулфонамидна група: експериментални ИЧ и квантовохимични изследвания» за присъждане на научна и образователна степен **Доктор**, професионално направление 4.2. **Химически науки**, специалност **Органична химия**

от проф. дхн Соня Илиева, ФХФ, СУ «Св. Климент Охридски»

Ангелина Попова е родена на 08.07.1980, завършила е средното си образование в ПМГ - гр. Димитровград. Завършва висше образование в ХФ на СУ през 2005 г. като магистър по Медицинска химия, след бакалавърска степен със специалност Химия и физика. През 2006 г. постъпва на работа като химик в ИОХЦФ, БАН, Лаборатория СОА, където понастоящем е главен асистент. От 2009 г. е редовен докторант в Лабораторията с ръководител проф. Иван Бинев и доц. Е. Велчева, отчислена е с право на защита на 09.12.2011.

Дисертационният труд се състои от четири основни части: литературен обзор, опитна част, квантовохимични изчисления, резултати и обсъждане. Литературният обзор е върху биологичната активност на изследваните съединения, техния синтез и вибрационни спектри. В раздел IV, освен преглед на използваните квантовохимични методи, е представена и методологията на работа при проведения теоретичен анализ.

Научноизследователската работа, включена в дисертационния труд е посветена на систематично проучване и охарактеризиране на строежа, конформационната изомерия и ИЧ спектри на четири сулфонамидни съединения, три от които са фармацевтични препарати, а четвъртото се използва в практиката като хранителна добавка. Освен проучвания върху неутралните молекули, работата включва изследване и на съответните азаниони, за които данни в научната литературата не са публикувани или ако има такива, те са оскъдни и непълни. За постигане на пълно отнасяне на спектралните ивици са синтезирани и изследвани деутерирани аналози на съединенията. Основната цел на дисертационния труд е формулирана в края на уводната част.

В работата е проведен теоретичен конформационен анализ. Поради практическото им приложение, неутралните молекули са били предмет на редица изследвания. Моля докторантката да направи обобщително сравнение на резултатите от конформационния анализ на неутралните молекули, които е получила и публикувани такива, в случай, че са налични.

Как е проведено конформационното сканиране за сулфацетамид – като „*single point*” изчисления или с оптимизация на всяка стъпка – “*relaxed PES scan*”? В този смисъл бих отбелязала, че е по-удачно провеждане на конформационно търсене с едновременно вариране на трите торзионни ъгли. Техническа забележка: на фигури 11÷13 не са означени величините, нанесени на абсцисата и ординатата.

Въз основа на теоретични и експериментални данни в работата е направено детайлно отнасяне на ивиците в ИЧ спектрите на изследваните съединения. Във връзка с приложената процедура на корелационно сканиране имам следния въпрос: има ли случаи (докторантката срещала ли е такива), при които корелационният коефициент между изчислени и експериментални честоти е по-малък (например  $< 0.99$ )?

При сравняване на данните за сулфаниламид (стр. 50, 52) във валентната област на спектъра (Фигура 5) ясно се наблюдават 4 силно интензивни ивици, а в Таблица 3 едната от тях е отнесена като „very weak”, освен това са разменени местата на ивиците при 3343 и 3374 (в KBr). Моля за уточнение.

При отнасянето на ивиците в ИЧ спектъра на сулфагуанидин в Таблицы 21,22 в колона „Описание” са дадени и числа. Ако тези числа изразяват смесването на трептенията и съответстват на процентното участие на различни трептения за дадена честота, как са получени?

Като цяло дисертацията е оформена прецизно. Позволявам си да отбележа някои изрази: вместо «предсказания» (стр. 26 и изводите), смятам за по-удачно да се използва «предсказване», вместо «равнище» на изчисления – «ниво», «тотална» енергия – «обща» енергия. На стр. 43 «*I*» е интензитет на преминалата, а не на отразената светлина. В първия извод на дисертацията е отбелязано, че „Комбинираното използване на експериментални и теоретични методи ... е довело до развитие и уточняване на строежа и силовите полета...”: смятам, че понятието „развитие на строежа” в случая е неправилно, а за „развитие и уточняване на силови полета” не става въпрос в дисертационния труд.

Изследванията по темата на дисертацията са публикувани в 5 научни статии, от които 2 – в международни издания с импакт фактор – *IJQC (IF 1.3)*, *J. Mol. Struct. (IF 1.45)* със забелязани 8 цитирания, 1 – в *Asian Chem. Lett.*, 2 – в български списания. Броят на публикациите надвишава изискванията за присъждане на ОНС Доктор. Гл.ас. А. Попова е представила своите научни изследвания на 5 международни и национални научни форуми. Участвала е в 3 научни проекта към НФНИ.

### **Заклучение**

Научните изследвания в дисертационния труд на Ангелина Попова, посветен на изучаване на структурата и ИЧ спектрите на сулфонамиди и техни азаниони чрез комбинирано приложение на експериментални и теоретични подходи, представляват определено научно постижение, имат елемент на новост за науката и обогатяване на съществуващите знания. Бих желала да подчертая прецизността и последователността на проведените изследванията, както и направения систематичен анализ на резултатите. Въз основа на гореизложеното убедено препоръчвам да бъде присъдена научна и образователна степен **Доктор на Ангелина Делчева Попова.**

21.08.2013

София

проф. С. Илиева