

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Росица Петрова Николова
Институт по минералогия и кристалография при БАН
Член на научното жури

относно дисертационния труд на Вера Венциславова Денева
представен за придобиване на образователната и научна степен „доктор”
по научната специалност Органична химия, шифър 01.05.03

Дисертационният труд на Вера Денева, озаглавен *„Експериментални и теоретични изследвания на тавтомерни системи на основата на азо-нафтоли и техните азометинови аналози”* е посветен на материали с потенциал за приложение в молекулната електроника. Чрез насоченото моделиране на 4-(фенилдиазенил)нафтален-1-ол се показва принципната възможност за разработване на нови тавтомерни молекулни превключватели и оптични сензори на основата на структурно сходни с използваното съединение Шифови бази.

За постигане на целта на дисертационния труд *„да покаже принципната възможност за разработване на нови тавтомерни молекулни превключватели и оптични сензори чрез структурни модификации на 4-(фенилдиазенил)нафтален-1-ол и структурно сходни Шифови бази, използвайки тавтомерния пренос на протон и обратимостта на тавтомерните равновесия“* авторката ясно формулира четири основни задачи.

Представеният текст описващ работата на докторантката по изпълнението на поставените задачи е от 86 страници, а резултатите са представени в 4 таблици и 34 фигури. Цитирани са 142 литературни източника, обхващащи периода от 1863 до 2012 година. Дисертационният труд е разделен на четири глави: литературен обзор, резултати и обсъждане, експериментална част и изводи. В първа глава е направен исторически преглед на изучаването на явлението тавтомерия, както и обзор на изследванията свързани с различните възможности за постигане на тавтомерно равновесие и съответно неговото отместване в желана посока. Обемът и периодът на цитираната литература показват, че авторката познава добре състоянието на изследвания проблем. Във втора глава ясно са представени резултатите и е направена коректна интерпретация на получените експериментални данни. Забелязва се неточност

при представяне на резултатите от монокристалния рентгено-структурен анализ. Фигура 1.1 не показва „Кристална структура на 1.12. а две молекули и водородната връзка, която ги свързва. Понятието кристална структура предполага информация за тримерното периодично подреждане на молекулите. Подобно фигури 2.12, 2.20, 2.21 и 2.22 не представят „Рентгено-структурен анализ“. Това са резултати от анализа, а още по-коректно би било да се каже, че на фигурите е показана структура на молекулата с уточнени термални елипсоиди на неводородните атоми. Изследванията, проведени в дисертационния труд са планирани прецизно и предполагат голям обем експериментална работа по синтез, спектрални и дифракционни анализи, както и квантово-химични изчисления. Предвид сериозността на работата и необходимостта от оценяване на резултати от различни по своето естество анализи, предполагам, че докторантката е запозната с основните характеристики на всеки от използваните методи. За съжаление, обаче всички тези знания остават „скрити“ защото експерименталната част на дисертационния труд е само две страници и половина и описанието на всеки от използваните методи е доста кратко. Вероятно целта е била да се съкрати обема на дисертационния труд, но малко по-подробно описание на аналитичните методи според мен би допълнило общото впечатление за добре планирано и прецизно осъществено изследване. Изводите са основани на получените резултати и съответстват на поставените задачи, затова може да се счита, че целта на дисертационната работа е осъществена.

Резултатите от изследванията по дисертационния труд са представени на осем научни конференции и са оформени в четири публикации в списания с импакт фактор. Трябва да отбележа, че публикуването на част от резултатите в списание *Angewandte Chemie*, което за 2012г. има импакт фактор 13.734, е безспорно доказателство за значението на извършените изследвания. Интересът към тематиката се потвърждава и от факта, че публикациите излезли от печат през 2009 и 2010г. имат вече общо дванадесет цитата.

Като цяло работата е много интересна и затова оценката ми е положителна. Имайки предвид посочените по-горе актуалност и качества на извършените изследвания си позволявам да препоръчам на уважаемото научно жури да присъди на Вера Венциславова Денева образователната и научна степен „доктор“.

София 9.08.2013 г.

Подпис:

(доц. д-р Росица Петрова Николова)