

СТАНОВИЩЕ

от проф. дхн Васил Борисов Делчев,
от катедра Физикохимия, Пловдивски университет
върху материалите за защита на дисертация
за придобиване на образователна и научна степен „Доктор”
в Института по обща и неорганична химия – Българска академия на науките

Област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика
Професионално направление: 4.2. Химически науки
Научна специалност: Теоретична химия

Докторант: Нина Стоянова – Нанкова, ИОНХ

Тема на дисертационния труд: „Теоретично изследване на специфично влияние на средата върху механизма на протонен пренос при мономерни единици на нуклеиновите киселини и биологично активни съединения”

Научен ръководител: проф. дхн Венелин Енчев

Заповед на директора на ИОНХ за определяне на състава на НЖ: **РД-09-124/12.07.2023 г.**
Решение на първото заседание на НЖ: **да изготвя становище.**

Всички материали по защитата на докторската теза за присъждане на образователна и научна степен „Доктор” на Нина Стоянова са представени в дигитален формат. Документите включват: 1) Заповеди на Директора на ИОНХ за зачисляване (№ РД-09-78 / 28.06.2019 г.) и отчисляване на докторанта (№ РД-09-92 / 14.06.2022); 2) удостоверения / протоколи за издържани изпити по време на докторантурата; 3) стандартен образец на автобиография; 4) диплома за висше образование – само за магистърска степен; 5) списък на публикациите, включени в дисертацията; 6) списък с цитирания; 7) списък с участия в конференции и други научни изяви, награди; 8) дисертация; 9) автореферат – само на български език.

Биографични бележки

Нина Стоянова е родена в гр. София, България. В периода 2011 – 2016 г. тя се обучава в бакалавърската специалност „Компютърна химия” на Софийския университет „Св. Климент Охридски”. През 2018 г. се дипломира с магистърска диплома по „Медицинска химия” в същия университет. През 2018 и 2021 г. тя преминава обучение в две летни школи. След завършване на бакалавърската степен Нина Стоянова е назначена на позиция „Химик” в Института по органична химия – БАН. Две години по-късно е избрана на позиция „Асистент” в същия институт в Лабораторията по „Структурен органичен анализ”. През 2019 г. докторантката се премества в Института по обща и неорганична химия – БАН, където заема същата позиция. От май 2023 тя е преназначена на позиция „Химик” в ИОНХ в Лабораторията по „Теоретична и изчислителна химия”.

Нина Стоянова декларира добри познания по английски език (ниво B2). Нейните персонални умения са свързани с използване на квантовохимични програми като GAMESS, Gaussian, FireFly и MOPAC др., а също и графични / визуализиращи програми като Origin и Chemcraft. Докторантът декларира в автобиографията шест научни публикации с импакт фактор – пет с квантил Q2 и една с квантил Q1. Кандидатът изпълнява минималните национални изисквания за придобиване на образователна и научна степен „Доктор”.

Значимост на тематиката

Дисертацията разглежда важни за науката въпроси, свързани с тавтомерните равновесия в нуклеобазите на ДНК /РНК и техни производни. Специално внимание е отделено на влиянието на средата върху тавтомерните превръщания и е показано, че разтворителят може да измени драстично кинетиката и термодинамиката на процесите. Това са въпроси от особена важност за предсказване на различни свойства на изследваните системи в разтворители (основно вода) и за контрол на реакциите, в които участват с цел избягване на негативни процеси, които могат да се наблюдават в живя свят (например точкови мутации и др.).

Публикации, включени в дисертацията

Резултатите от изследванията в дисертацията са публикувани в три списания с висок импакт фактор: *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics* (Q2), *Photochemistry and Photobiology* (Q1) и *International Journal of Quantum Chemistry* (Q2). Статията в първото списание е цитирана пет пъти в други специализирани научни издания. Сумарният импакт фактор на списанията с публикации е около 8,5. Резултатите от дисертацията са докладвани на 7 научни форума. Получена е една награда.

Методология

Реакциите и взаимодействията в дисертацията са изследвани с квантовохимични методи, които са включени в стандартните пакети на програмите GAMESS-US и GAUSSIAN. Повечето изчисления са проведени с функционали от Теорията на функционала на плътността, а така също и с пертурбационната теория на *Møller-Plesset*. Някои изчисления са извършени с *coupled-cluster* методите CCSD и CCSD(T). Подбраните методи са достатъчно точни и надеждни за предсказване на свойствата на изследваните системи и реакционни механизми.

Средата (вода) е моделирна чрез прилагане на два принципни подхода: 1) използване на стандартни континуумни модели, включени в квантовохимичните пакети GAMESS-US и Gaussian; 2) използване на дискретни модели на взаимодействията молекула(и) разтворител – изследвана система.

Скоростните константи на реакциите са изчислени по уравнението на Ейринг (8), което е записано грешно в дисертацията (липсва знакът минус пред ΔG^\ddagger). В тази връзка възниква логичният въпрос: дали скоростните константи са изчислени с уравн. (8) или знакът минус е взет предвид?! Друг въпрос е каква е логиката на уравн. (9) за обратими реакции? То представлява сума от две скоростни константи и не разбирам, защо е наречена наблюдаема скоростна константа! Също така не съм съгласен с написаното на стр. 38 че „... при висока температура, $k < 1$.” Освен това трансмисионният коефициент е близък до единица само за адиабатни реакции, но в общия случай той трябва да се предвиди в уравнение (8). За реакциите на тунелиране той дори е по-голям от единица.

Автореферат

Авторефератът на български език обхваща 40 страници и описва основните моменти от дисертацията. Не намерих английска версия на автореферата в приложените документи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените материали по настоящата процедура отговарят на изискванията на ЗРАС в РБ, неговите правилници и минималните национални изисквания в професионалното направление. Смятам, че Нина Нанкова е изграден учен и може да провежда самостоятелни изследвания в областта на изчислителната органична химия

и химията на реакционните механизми. Предвид на това и гореизложеното, давам своята **положителна оценка** за присъждане на ОНС “Доктор” на Нина Стоянова - Нанкова в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление: 4.2. Химически науки; научна специалност: Теоретична химия.

18.09.2023 г.
гр. Пловдив