

СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Борис Л. Шивачев,
член на научни жури назначено със заповед РД-09-152/19.06.2020 г.

Институт по минералогия и кристалография "Акад. Иван Костов"

Адрес: ул. "Акад. Георги Бончев", бл. 107, 1113 София

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен 'доктор'

в област на висше образование: Природни науки, математика и информатика
професионално направление : 4.2. „Химически науки“,
докторска програма : Органична химия.

Автор: СИЛВИЯ ХРИСТОВА ХРИСТОВА, докторант в ИОХЦФХ -БАН

Тема: *ТАВТОМЕРИЯТА КАТО ЕЛЕМЕНТАРЕН МЕХАНИЗЪМ ЗА ПРЕНОС НА СИГНАЛ ПРИ МОЛЕКУЛНИТЕ УСТРОЙСТВА*

Научен ръководител: проф. дхн Людмил Антонов, ИОХЦФХ -БАН

Дисертационният труд разработен от Силвия Христова обхваща 187 страници с включени 79 фигури, 15 таблици и 37 схеми (без да се броят неномерираните схеми на съединения в текста – 17 бр.). Цитирани са 193 литературни източника. Дисертационният труд е оформен класически и съдържа следните глави: Литературен обзор който завършва с Цел и Задачи на дисертацията, Експериментална (опитна) част, Резултати и обсъждане, Изводи, Приноси и Литература.

Темата на дисертацията е в актуалното направление на органични молекулни електронни компоненти. Изследваните материали се получават (синтезират) въз основа на подходящо избрани реакционни механизми и схеми с оглед на последващото изследване на потенциалните свойства. В този смисъл темата е перспективна, с потенциална практическа насоченост и може да служи като основа на бъдещи изследвания.

Литературният обзор е представен на 52 страници, и е разделен на три подраздела, като без да се правят явни изводи в явна форма той е в основата за определяне на целта на дисертацията и задачите на дисертацията.

Целта на настоящата дисертация е формулирана ясно и е насочена към изследване на възможната тавтомерия и нейният ефект върху превключващото действие при девет моделни системи. За постигане на целта са формулирани три основни задачи включващи изследвания на моделните системи чрез абсорбционна UV-Vis спектроскопия и ЯМР в разтвор, и обяснение на наблюдаваните промени на моделните системи на база на квантово-химични изчисления.

Експерименталната част обхваща 10 страници: включващи описание на Синтеза на вещества 2.1-2.3 и 3.1-3.4, и кратки данни за охарактеризирането им, описание на апаратите използвани при спектралните измервания и Рентгеноструктурен анализ, както

и кратки данни за избраните модели, базиси, корекции, приближения и т.н. при квантово-химичните изчисления.

Частта **Резултати и дискусия** систематизира получените данни в 2 глави: **III.1** Молекулно превключване при структурно модифициран Судан I (съединения 2.x) и **III.2** Молекулни роторни превключватели (съединения 3.x). Доказано е че, съединения 2.2-2.3 съществуват като тавтомерни смеси в разтвор, като равновесието може да се контролира чрез протониране/депротониране на хидроксилната група. При съединение 3.1 е направено заключение, че багрилото съществува като смес от два изомера на един от тавтомерите, което се различава от Mahmudov et al. [137]. Квантово-химичните изчисления предсказват, че увеличаването на броя на кондензираните ароматни ядра при 3.5 и 3.6 не влияе съществено върху конформационното равновесие. Доказано е, че използването на 2J константи при роторните превключватели „E, E', Z, Z'“ в разтвори, дава възможност за разграничаване на всеки от изомерите, вследствие на представяне като уникална логическа комбинация от 2J константи.

Направените **Изводи** и посочените **Приноси** обобщават дискусията направена в частта Резултати и дискусия и показват, че докторантът Силвия Христова се е справила успешно с всички етапи от дисертационния труд.

Нямам принципни забележки по дисертацията на Силвия Христова, но за мен представлява интерес да се обясни не толкова често срещаната употреба на втора производна при определянето на „Точното положение на максимумите“ на абсорбционните криви“?

В заключение смятам, че дисертацията на **Силвия Христова** се занимава с интересен и съвременен проблем, свързан с изследването на процесите позволяващи контролиране на стабилността и свойствата на молекулни разтвори на молекулно ниво. Тя представлява научно изследване, проведено на високо експериментално ниво при използването на съвременни техники, резултатите от което са обсъдени критично и задълбочено. Представеният дисертационен труд, извършената научна работа напълно отговаря по обем, методично ниво и брой публикации в научната литература на Изискванията посочени в Закона за развитие на академичния състав и Правилник за прилагане на закона за развитие на академичния състав и на критериите на Института по органична химия с център по фитохимия – БАН.

На базата на изложеното по-горе давам своята положителна оценка и предлагам на Научното жури да присъди на **Силвия Хр. Христова** образователната и научна степен „доктор“ в професионално направление 4.2. „Химически науки“ по докторска програма: Органична химия.

30 юли 2020 г.

ИЗГОТВИЛ СТАНОВИЩЕТО:

проф. д-р Борис Л. Шивачев