

СТАНОВИЩЕ

върху дисертационен труд, за придобиване на научна степен “доктор на науките”

Автор на дисертационния труд: Румяна Златинова Янкова-Аврамова

Тема на дисертационния труд: Структура и функционални свойства на оксоселенати (IV, VI)

Член на научното жури: проф. д.н. инж.-хим. Пантелей Петров Денев

Актуалност на разработвания в дисертационния труд проблем в научно и научно-приложно отношение

Представеният дисертационен труд разглежда структурата и функционалните свойства на оксоселенати (IV, VI). Селенсъдържащите съединения представляват динамично развиваща се изследователска област с висока научна и приложна стойност. Те се характеризират с богато структурно разнообразие, обусловено от гъвкавите координационни възможности на селенатните аниони и влиянието на координиращите метали върху кристалната архитектура. Това структурно многообразие е в основата на широк спектър от функционални свойства - магнитни, оптични, нелинейно-оптични, каталитични, термични и биологични.

Съвременните данни свидетелстват, че двойните селенати и селенити с преходни метали притежават значителен потенциал за приложение както в областта на материалознанието – като нелинейно-оптични материали, катализатори и функционални наноструктури, така и в биомедицината - като източници на биологично активен селен, антиоксиданти и потенциални противотуморини агенти. Особено внимание заслужават комплексните зависимости между вида на координиращия метал и проявлението на структурни, термични и оптични характеристики, които пряко влияят и върху биологичната активност на тези съединения.

Целта и задачите, поставени от проф. Янкова в настоящата дисертация са напълно обосновани, като получените резултати ще допринесат за задълбочаване на разбирането за връзката между структурата, физикохимичните свойства и биологичната активност на тези съединения, както и да открият перспективи за тяхното приложение в оптоелектрониката и медицината.

Степен на познаване на състоянието на проблема и на литературния материал

Първата съществена част на дисертацията представлява добре структуриран и развит литературен обзор, посветен на актуалния проблем, с който е ангажирано научното изследване на дисертанта. Тази част свидетелства за доброто и задълбочено познаване на проблема от проф. Румяна Янкова, което ѝ е позволило по-нататък да развие правилно научното изследване. Посочени са 339 литературни източника.

В литературния обзор са представени характеристиките на селена и неговите свойства, както и свойствата и приложенията на селенити и селенати и техните двойни съединения като биологично активни вещества.

Разгледани са детайлно и са съпоставени приликите и разликите между различните параметри на селена в биологичните системи. В обобщен вид са представени основните органични форми и съдържанието им в растителни и хранителни продукти, географското им разпространение, необходимият дневен прием. Отбелязани са терапевтичният ефект, антитуморното и антибактериално въздействие, антиоксидантна активност и подмладяващи стимули. Обърнато е внимание и на неговата токсичност, при повишени дневни дози на прием.

Направен е подробен анализ на известното в литературата по напредъка в синтетичните методи през последните десетилетия и целенасочено получаване на широк набор от нови селенови съединения с разнообразни физикохимични и биологични характеристики, притежаващи уникални структурни и функционални особености. Тези материали намират приложение в редица области – от стъкларската и керамичната промишленост, през полупроводниковата техника и микроелектрониката, до фармацевтичната индустрия и агрохимията. Нарастващият интерес към оксоселенати (IV, VI) се дължи не само на техните оптични, магнитни и каталитични свойства, но и на възможността да се модифицират структурно с цел оптимизиране на функционалните им характеристики за специфични приложения.

Прегледаните източници показват, че наноформи на селенови съединения, включително сребърни наночастици, сребърен селенат и селенсъдържащи метални оксиди, съчетават висока биологична активност с възможности за целева доставка и диагностични приложения.

Обзорната част завършва с обосноваване на целта на дисертационната работа и произтичащите от нея задачи.

Съответствие на избраната методика на изследване с поставената цел и задачи на дисертационния труд

Проф. Р. Янкова познава в детайли състоянието на проблема, което ѝ позволява да избере подходяща методика за провеждане на научното изследване и за даване на отговор на целта и задачите, които тя си е поставила. В една логична последователност са синтезирани 15 селенови съединения: селенити, селенати, както и двойни соли на алкални метали с d- и с f-елементи, които са изсушени, пречистени и охарактеризирани с познатите съвременни методи и апаратура.

Формулираната цел и поставените задачи отговарят напълно на използваните химични, инструментални методи (рентгеноструктурен анализ (SCXRD), диференциална сканираща калориметрия (DSC), UV-vis и IR спектроскопия) и методите за определяне на биологична активност: клетъчна преживяемост (Crystal violet), клетъчна морфология (Crystal violet), зета-потенциал и размер, оцветяване за актин. Получените експериментални данни са обработени компетентно чрез квантовохимични компютърни изчисления: на молекулния електростатичен потенциал, анализ на граничните молекулни орбитали, анализ на повърхността на Хиршфелд, Анализ на градиента на намалена плътност (RDG), DFT пресмятания на нелинейните оптични свойства,

Приноси на дисертационния труд

По оригиналност на своята постановка проведените експериментални изследвания могат да бъдат причислени към формулирането и обосноваването на нов научен проблем, при който се прилагат принципите на „зелената химия“. В хода на своите научни изследвания проф. Янкова е предложила нови методи и оригинални научни подходи, получила е нови факти и е разработила нови технологични решения.

Някои от основните приноси на дисертационния труд са:

Научни приноси

- Извършена е структурна характеристика на синтезираните от дисертантката оксоселенати на алкални и преходни метали, като е доказано влиянието на големината на алкалния катион и електронната конфигурация на преходния метал върху координационната сфера и стабилността на кристалната решетка.
- Чрез AIM и NBO анализи е доказано, че изследваните оксоселенати формират стабилизиращи водородно-свързващи мрежи.
- Изяснена е зависимостта между броя и характера на водните молекули и началната температура на дехидратация.

- На част от синтезираните съединения е определена биологичната активност и е показано, че са с потенциални приложения в онкотерапията като перспективен антиканцерогенен агент.

- Създадена е унифицирана експериментално-теоретична методология, като е разработен последователен подход, включващ хидротермален синтез, рентгеноструктурен анализ, инфрачервен и термичен анализ, съчетан с квантовохимично моделиране (DFT, NBO, AIM, RDG), което осигурява пълна връзка между експериментални и теоретични данни.

Приложни приноси

- Част от изследваните съединения са с доказан потенциал като нелинеен оптичен материал, поради високата първична хиперполяризуемост, което ги прави подходящи за разработване на нови фотонни и лазерни устройства или могат да бъдат използвани за генериране на нелинейни оптични ефекти.

- Оксоселенатите показват йонна проводимост, което открива възможности за тяхното приложение като твърдотелни електролити в батерии и йоннопроводящи материали.

- Желязо- и кобалтсъдържащите селенати демонстрират електронна делокализация и редокс-активност, което ги прави перспективни като катализатори в окислително-редукционни процеси, включително в органичен синтез и екологично значими реакции.

- Установената висока цитотоксична активност и способността да образуват отрицателно заредени наночастици със стабилен зета потенциал от някои селенати ги правят потенциални кандидати за включване в наномедицински платформи с насочено действие.

- Двойните селенати с алкални и преходни метали могат да намерят своето екологично приложение като сорбенти и стабилизатори за селективно задържане на замърсители (вода, тежки метали, полярни молекули).

- Предложените регресионни модели и определените кинетични параметри на разлагане могат да бъдат използвани за прогнозиране на поведението на селенитни и селенатни материали при нагряване, което има практическо значение за керамични, стъклокерамични и катализаторни технологии.

Преценка на публикациите по дисертационния труд

Резултатите от дисертационния труд са представени в 20 научна публикация в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science и Scopus). Проф. Янкова има участие в 9 национални научни проекта, ръководител е на 3 научни проекта от национално значение и е публикувала 3 университетски учебни пособия.

Представен е списък с 96 цитата в научни издания, реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация, което е доказателство за оригиналността на получените резултати.

С представените 821,4 точки за наукометрични показатели, проф. д-р Румяна Златинова Янкова покрива минималните изисквания предвидени в ППРАСРБ от 350 т., както и тези на БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“ от 700 т. Декларирам, че не съм установил елемент на плагиатство в представените научни материали.

Мнения, препоръки и бележки

Високото научно ниво, на което е представен дисертационният труд, показва че проф. Янкова е учен със задълбочени познания както в областта на неорганичната химия и физикохимията, така и в химията на биологично активните вещества. Дисертационният труд съдържа 391 стандартни страници, 75 таблици и 117 фигури. Библиографията включва 339 литературни източника. Това потвърждава стойността на дисертацията, която остава както с научните приноси на включените в нея изследвания, така и с прецизното оформяне на материалите, свързани с тези изследвания.

Заклучение

Представеният дисертационен труд разглежда актуалния проблем за структурата, функционалните свойства и приложението на оксоселенати (IV, VI). В резултат на проведените на високо научно ниво изследвания са получени оригинални научни резултати и са постигнати значими научни и научно-приложни приноси в областта на химията на оксоселенатните съединения. С увереност считам, че са спазени изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България, Правилника за прилагането му и Правилника на БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“ за прилагане на Закона.

След направения анализ давам положителна оценка на разработения дисертационен труд и гласувам проф. д-р Румяна Златинова Янкова-Аврамова да придобие научната степен „доктор на науките“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, научно направление „Неорганична химия“

Изготвил становището:

проф. д.н. инж.-хим. Пантелей Денев