

РЕЦЕНЗИЯ

от доц. д-р Рени Томова от Институт по оптически материали и технологии "Акад. Йордан Малиновски" (ИОМТ) – БАН

на материалите по конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2 „Химически науки“ специалност „Физикохимия“, обявен за нуждите на ИОМТ- БАН в ДВ брой 41 от 21.05.2019г.

Кандидат: д-р Силвия Емилова Ангелова, доцент в Института по органична химия с Център по фитохимия (ИОХЦФ) - БАН.

1. Общо представяне на получените материали

Предмет:

Със заповед № 383 от 19.07.2019г. на Директора на ИОМТ съм определена за член на научното жури на конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ в ИОМТ - област 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Физикохимия, **обявен за нуждите на** Институт по оптически материали и технологии "Акад. Йордан Малиновски" (ИОМТ) – БАН.

Документи за участие в него е подал един единствен кандидат – гл. асистент д-р Силвия Емилова Ангелова от Института по органична химия с Център по фитохимия (ИОХЦФ) – БАН.

Представени от кандидатката са всички документи и материали, изисквани по процедурата от Чл. 13 на Правилника за приложението на ЗРАСРБ в ИОМТ: Автобиография по европейски образец, Диплом за образователната и научна степен „доктор“, Медицинско свидетелство, Свидетелство за съдимост, Списък и отпечатъци на публикации, Списък на участия в конференции, Списък на участия в проекти, Списък на цитиранията, Удостоверение за минимален петгодишен стаж по специалността, Удостоверение за минимален двугодишен стаж на длъжност „главен асистент“, Справка за изпълнение на минималните изисквания в Приложение 1, Таблица 1, Хабилизационна разширена справка за научните приноси в публикациите, представени вместо хабилизационен труд – монография, Доказателствен материал за участия в проекти, Копие от обявата за откриване на конкурса в Държавен вестник). Те дават възможност за пълна и точна оценка в съответствие с изискванията на ЗРАСРБ – Чл.24., Чл.24. 1, Чл.24. 2а), Чл.24. 3, Чл. 2б и Чл. 2б (3) и Правилника за приложението му в ИОМТ – Чл. 2. и Чл. 2. 5.3., както следва:

- По Чл. 24 от ЗРАСРБ „ Кандидатите за заемане на академичната длъжност „доцент" трябва да отговарят на следните условия: Чл.24. 1– „да са придобили образователна и научна степен „доктор“, Чл. 24. 2а) „не по-малко от две години да са заемали академична длъжност „асистент“ „главен асистент“, Чл.24. 3. „да са представили публикуван монографичен труд или равностойни публикации в специализирани научни издания, които да не повтарят представените за придобиване на образователната и научна степен „доктор“.“

- Кандидатката има придобита образователна и научна степен „доктор“ (диплома 33406/20.07.2009г. на ВАК) и от 01.01.2011 г., заема академичната длъжност „Главен асистент“ в научното направление на конкурса (Удостоверение за трудов стаж). За участие в конкурса тя е представила 28 публикации (отделно са описани 5 публикации, използвани при придобиване на образователната и научна степен „доктор“).
- По Чл. 26 от ЗРАСРБ. Кандидатите за придобиване на научна степен и за заемане на академичните длъжности „главен асистент“, „доцент“ и „професор“ трябва да отговарят на минимални национални изисквания към научната и преподавателската дейност, Чл. 26. (3) Минималните национални изисквания по ал. 2 по научни области и/или професионални направления за придобиването на всяка научна степен и заемането на всяка академична длъжност се определят въз основа на група показатели и се изразяват в минимален брой точки, които трябва да получи кандидатът в съответствие с индивидуалните си резултати по тези показатели.
- По Чл. 2. (1) от Правилника за приложение ЗРАСРБ в ИОМТ - „Кандидатите за научни степени и за заемане на академични длъжности следва да покриват минималните наукометрични изисквания на БАН в област 4. Природни науки, математика и информатика за професионалните направления 4.1. Физически науки и 4.2. Химически науки, съгласно Приложение 1 (неразделна част от този Правилник) и специфичните изисквания на ИОМТ. Приложение 1, Таблица 1 дава минималните наукометрични изисквания на БАН противоречат на минималните национални изисквания в Правилника за приложение на ЗРАСРБ“.
- От представената от Силвия Ангелова справка за изпълнение на минималните изисквания в Приложение 1, Таблица 1 се вижда, че кандидатката има общо 906 точки от необходимите за покриване на минималните изисквания за заемане на академичната длъжност „доцент“ 430 точки.

2. Кратки биографични данни на кандидата

Силвия Ангелова е родена на 28.04.1972г. Завършила е магистърска степен по „Химия“ в СУ „Св. Климент Охридски“ със специализация „Органична и аналитична химия“ през 1995г. През 2009 г. защитава докторска дисертация по научната специалност 01.05.01 “Теоретична химия” на тема: „Квантово-химично изчислените ЯМР параметри като средство за изследване на тавтомерни и конформационни равновесия“

През 1996 г. постъпва на работа като химик в Лабораторията по „ЯМР-спектроскопия“ на Института по органична химия с Център по фитохимия (ИОХЦФ) – БАН. От 2005 до 2011г. работи като научен сътрудник III ст. и II ст. към лаборатория „Физична, органична и изчислителна химия“, а от 2011г. до днес - заема академичната длъжност „главен асистент“ в същия институт. За периода 2012-2019г. има 5 специализации в Испания: 12 месеца като „постдокторант“ и 6 месеца като специализант.

3. Обща характеристика на научната дейност на кандидата

Д-р Ангелова има значителна научна продукция, добре популяризирана в международни списания и научни форуми. Общият брой на публикациите ѝ за периода 2000 - 2019 година е 61, 55 от които са индексирани в базата данни на WoS и Scopus. За същия период тя има h-index 10 (WoS), 9 (Scopus) и регистрирани и 244 цитата (Scopus). За последните три години е присъствала общо на 43 международни научни форуми (от които 5 в чужбина), където е представила 5 устни доклада и 38 постера.

Наред с това кандидатката е взела участие в пет национални проекта: три с ФНИ и два по Оперативна програма "Наука и образование за интелигентен растеж" и в 6 международни научни или образователни проекта (включително такива по двустранни спогодби за научно сътрудничество и обмен на БАН) с Македония, с Руската и с Полската академии на науките, с Швейцарската национална научна фондация (по един) и с Италия (два).

4. Обща характеристика на трудовете на кандидата

За участие в конкурса д-р Ангелова е представила 28 научни публикации (26 от които в Q1, Q2, Q3 и Q4 квантила), разделени на 2 групи, съгласно Приложение 1, Таблица 1:

- Публикации, приравнени на хабилизационен труд (група показатели „В“, показател „4“): 14 броя (№23-25, 27, 29, 30, 33-36, 47, 51, 56, 57) с 34 цитата (от чуждестранни автори извън екипа, в който участва кандидатът).
- Публикации (група показатели „Г“, показател „7“): 14 броя (№1-3, 5-8, 13, 16-18, 20, 21, 31) – с 64 цитата (от чуждестранни автори извън екипа, в който участва кандидатът).

Извън конкурса Силвия Ангелова е предоставила още 5 публикации (№4, 9-11, 14), използвани при придобиването на образователната и научна степен „доктор“ и 28 други публикации (№15, 19, 26, 28, 32, 37-46, 48-50, 52-55, 58-61) с 146 цитата.

5. Основни научни приноси

Д-р Ангелова работи в областта на „теоретичната химия“ в една от първите в света лаборатории по квантова химия, създадена в ИОХ-БАН от проф. Н. Тютюлков. Съвременните изследвания в тази област съчетават концепции от класическата, квантовата и статистическата механика с високопроизводителни изчислителни методи за изследване на молекулни свойства и реакции.

Основен обект на изследване в публикациите на кандидата [4-7, 9-12, 14-62] е електронната структура на молекулите и произтичащите от нея свойства посредством *ab initio* и DFT методи. *Ab initio* (неемпирични) методите имат за цел изчисляването на многоелектронната вълнова функция (решение на уравнението на Шрьодингер), използвайки математическо описание на орбиталите на една молекулна система. DFT методите се основават на Теорията на функционала на плътността, според която енергията на дадена молекула може да бъде определена от електронната плътност в нея вместо от вълновата функция.

5.1. Научни приноси в публикации група показатели „В“, показател „4“: 14 броя (№23-25, 27, 29, 30, 33-36, 47, 51, 56, 57)

Тези публикации могат да се групират тематично в три основни групи:

5.1.1. Приложение на квантово-химичните изчисления за изучаване на електронната структура в основно състояние и свойствата на багрила за фотоволтаични приложения [23,27,29,30,33,34,36,47].

С помощта на квантово-химични изчисления са получени данни за структурата на серия нови периленови [23], мероцианинови [27,29,36], скуарилиеви [30,34] и крокониеви багрила [33].

- ✓ Приложените изчислителни протоколи възпроизвеждат качествено добре експерименталните резултати, включително нелинейните оптични (НЛО) ефекти. Едноетапният синтез заедно със спектроскопските, солватохромните и НЛО свойства определят новите периленови багрила като обещаващи кандидати за определяне на полярността на разтворители, за фотоволтаични и нелинейни оптични приложения.
- ✓ Изследването на нови мероцианинови [27,29,36], скуарилиеви [30,34] и крокониеви багрила [33] като потенциални електроно-донорни компоненти в слънчеви клетки с обмен хетеропреход е допълнено с квантово-химични (DFT) изчисления, които дават информация за геометрията на багрилата в основно състояние. Изчислените енергии на HOMO и LUMO орбиталите и ширината на забраната зона са използвани за охарактеризиране на багрилата и за определяне на потенциала им за използване в слънчеви клетки с акцепторен компонент фулерен [60]PCBM.
- ✓ Симетрично и несиметрично заместени моделни структури на скуарилиеви и крокониеви багрила са изследвани теоретично като потенциални донори на електрони в органични фотоволтаични слънчеви клетки с акцепторен компонент [60]PCBM фулерен [47]. Ширината на забранените зони на всички предложени моделни съединения са от порядъка на около 2 eV, стойности типични за органичните полупроводници. За всички моделни съединения бяха предсказани високи стойности за силата на осцилатора, т.е. за тези багрила се очаква голям коефициент на поглъщане. Въз основа на резултатите от квантово-химичните изчисления е направено заключението, че някои от предложените багрила са подходящи за употреба като компоненти на оптоелектронни устройства.

5.1.2. Приложение на квантово-химичните изчисления за изучаване на електронната структура в основно и възбудено състояние на тавтомерни системи [24,25].

- ✓ С помощта на DFT и TDDFT изчисления е потвърден и изяснен механизмът на двоен пренос на протон във възбудено синглетно състояние (ESIPT) и при трите тавтомерни форми на новосинтезираното съединение 3,6-бис(4,5-дихидроксиоксазо-2-ил)бензен-1,2-диол [24], което го прави подходящо за употреба като фотостабилизатор, лазерно багрило и при сензори за метални йони.
- ✓ Демонстрирано е, че с помощта на квантово-химични изчисления може да бъде предсказано влиянието на статично външно електрично поле върху поведението на система от 3 тавтомерни форми на моделното съединение 2-(5-(benzo[d]oxazol-2-yl)-6-hydroxypyridin-2-yl)-3-hydroxy-1H-inden-1-one [25]. Установено е, че при

промяна на силата и посоката на електричното поле се стабилизират различни тавтомерни форми на молекулата, което прави системи, подобни на изследваната подходящи за проектирането на нови молекулни електронни устройства.

5.1.3. *Приложение на квантово-химичните изчисления за изучаване на електронната структура в основно състояние и свойствата на флуоресцентни багрила - биомаркери [35, 51,56,57].*

- ✓ Чрез квантово-химични изчисления е получена информация за структурата в основно състояние на нови монометин цианинови багрила [35,51,56,57], аналози на търговски продукт Тиазол Оранж, синтезирани по нова, щадяща околната среда процедура. Теоретичните изчисления са използвани за изследване на влиянието на заместителите в хромофорната система върху оптичните свойства на багрилата [51,56,57] и за получаване на информация за структурата на различните видове агрегати, съществуващи в разтвор. Въз основа на тях е потвърдена работна хипотеза за наличие на равновесие мономер-димер при два от случаите [35,57]. За целта са симулирани абсорбционните спектри на възможни мономери и димери и е показано, че ивиците в експерименталните спектри на съединенията отговарят на смес мономер-димер.

5.2. Научни приноси в публикациите по група показатели „Г“, показател 7 - 14 броя (№1-3, 5-8, 13, 16-18, 20, 21, 31).

Публикации [1-3,8,13] се отнасят за прилагане на експериментални методи за изследване на структурата и свойствата на органични съединения и комплекси.

Публикации [5-7,16-18,20,21,31] включват както само теоретични методи [5,16], така и комбинация от теоретични методи и експериментални техники, използвани за решаване на структурни и спектроскопски проблеми и предсказване на молекулни свойства. При изчисленията е използван широк набор DFT функционали: B3LYP [17,18,21,31], X3LYP [20], OLYP [20,21], B3PW91 [21], LC-BLYP [21], B2PLYP [21] и mPW2PLYP [22].

Изследвани са основно процеси на тавтомеризация [5-7,16,20,21,31], изомеризация [17] и конформационно равновесие [18]. Изброените процеси често се извършват в разтвор и изследванията, свързани с влиянието на разтворителя върху равновесието имат съществено значение поради факта, че структурата (и реактивоспособността) на молекулата може да е доста различна в среда на разтворител. Методи за отчитане на влиянието на разтворителя като диелектрик (имплицитни методи) са използвани в публикации [5,6,18].

За решаването на структурни или спектроскопски проблеми са използвани изчислени ¹³C химични отмествания: [5,7,16,20,31], което е своеобразно продължение на тематиката, на която е посветена дисертацията за ОНС „доктор“ (публикации [4,9-11,14]).

4. Оценка на личния принос на кандидата

Представените от кандидатката работи са колективни трудове, включващи по няколко автора. Независимо от това, вземайки предвид добре структурираните и формулирани приноси, смятам че д-р Ангелова има съществен личен принос в получаването на резултатите и оформянето на публикациите.

Нямам критични забележки и препоръки към кандидата.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Документите и материалите, подадени от гл. асистент д-р Силвия Емилова Ангелова, отговарят на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и Правилника за приложение на ЗРАСРБ в ИОМТ.

Кандидатката в конкурса е представила достатъчен брой научни трудове, публикувани след материалите използвани при защитата на ОНС „доктор“. Доказателственият материал отговаря на 906 точки, което над два пъти надвишава минималните изисквания на БАН и допълнителните изисквания на ИОМТ. В представените резултати без съмнение има достатъчно научни приноси, гарантиращи успешното бъдещото развитие на започнатата изследователка дейност.

Всичко това ми дава основание да дам своята положителна оценка и да препоръчам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОМТ за избор на д-р Силвия Емилова Ангелова на академичната длъжност „доцент“, област 4. Природни науки, професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Физикохимия“, в ИОМТ – БАН.

София,

12.09.2019г.

Рецензент:

.....

(доц. д-р Рени Томова)