

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Тодор Минков Дудев

Факултет по химия и фармация

СУ "Св. Климент Охридски"

относно конкурса

за заемане на академичната длъжност "доцент"

по професионално направление 4.2 Химически науки,

научна специалност „Физикохимия“

към Института по оптически материали и технологии, БАН

В конкурса за доцент, обявен в Държавен вестник бр. 41/21.05.2019 г. за нуждите на ИОМТ-БАН, участва само един кандидат: гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова. За участие в конкурса кандидатът е представил пълен комплект от документи в съответствие с изискванията на Правилника за прилагане на Закона за развитието на академичния състав в Република България. Документите са оформени много прецизно и предоставят изчерпателна информация за многостранната научно-изследователска и дейност на гл.ас. д-р Силвия Ангелова.

1. Кратки биографични данни

Силвия Ангелова е възпитаник на Химическия факултет на СУ "Св. Климент Охридски", където получава магистърска степен по „Органична и аналитична химия“ през 1995 г. През 2009 г., в Института по органична химия с център по фитохимия, БАН, под ръководството на проф. В. Енчев успешно защитава докторска дисертация на тема „Квантово-химично изчислените ЯМР параметри като средство за изследване на тавтомерни и конформационни превръщания“. От 2000 до 2005 г. работи като химик в същия институт, а от 2005 е назначена на длъжността научен сътрудник в лабораторията по Физична органична и изчислителна химия. През 2011 г. израства до главен асистент в института (лаборатория „Структурен органичен анализ“/„Теоретична химия“), където работи и досега. Провела е няколко задгранични специализации (като постдокторант и гостуващ учен) в Университета в Алкала де Хенарес (Испания), посветени на изследвания в областта на теоретичното моделиране на химични и биохимични процеси.

2. Общо описание на представените материали

Кандидатът гл. ас. Силвия Ангелова участва в конкурса с 28 броя публикации (отпечатани след получаване на ОНС "доктор"), от които 14 приравнени на хабилитационен труд (група показатели „В“, показател „4“) и 14 по група показатели „Г“, показател „7“. Допълнително е представен списък на общия брой публикации на кандидата (62). Представен е и списък със забелязаните цитати, участия на научни форуми и в научно изследователски проекти.

Публикациите за участие в конкурса могат да бъдат класифицирани както следва:

По вид:

- Публикации в научни реферирани списания – 28 броя
- Публикации в сборници от научни форуми – 0 броя;
- Научнопопулярни публикации – 0 броя;

По важност

- Статии в списания в кватил Q1 – 7 броя (статии 3, 5, 13, 20, 21, 23 и 51 от общия списък);
- Статии в списания в кватил Q2 – 9 броя (статии 1, 2, 7, 8, 17, 24, 25, 35 и 36 от общия списък);
- Статии в списания кватил Q3 – 5 броя (статии 16, 18, 29, 30 и 31 от общия списък);
- Статии в списания в кватил Q4 – 5 броя (статии 6, 27, 47, 56 и 57 от общия списък);
- Статии в списания без кватил – 2 броя (статии 33 и 34 от общия списък);

За отбелязване е фактът, че по-голямата част от статиите по конкурса са отпечатани в списания, заемащи челни позиции в съответните области на физикохимията и теоретичната химия (кватили Q1 и Q2).

Място на публикуване:

- Статии в реферирани български и чужди списания – 26 броя;
- Статии в нереферирани списания – 2 броя;

3. Отражение на научната продукция на кандидата в литературата (научни издания, монографии, колективни томове и патенти, реферирани и индексирани в Web of Science / Scopus:)

- Общо – 98 цитирания

4. Участие в научни форуми за периода 2016 - 2019

- Участие с/в доклади: Общо: 14
- Национални с международно участие: 9
- Международни: 5
- Участие с постери: Общо: 29
- Национални: 10
- Международни: 19

5. Участие в научно-изследователски или образователни проекти:

- Общо: 11

- Национални: 5
- Международни: 6

6. Научно-изследователска и педагогическа дейност на кандидата

6.1 Научно-изследователска дейност

Научната дейност на кандидата е в областта на теоретичната физикохимия: квантова химия, изчислителна химия и молекулно моделиране. Научните приноси на д-р Силвия Ангелова могат да се групират в следните направления:

I. Приложение на квантово-химичните изчисления за охарактеризиране на свойствата на багрила за фотоволтаични приложения [23, 27, 29, 30, 33, 34, 36, 47].

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

III. Приложение на молекулно-орбитални изчисления за изучаване на електронната структура в основно състояние и физико-химичните свойства на флуоресцентни багрила - биомаркери [35, 51,56,57].

IV. Комбинирани теоретично-експериментални изследвания на процесите на тавтомеризация и изомеризация на органични молекули [1-3, 5-8, 13, 16-18, 20, 21, 31]

По-конкретно, по направление I са постигнати следните резултати:

- С помощта на молекулно-орбитални изчисления са получени данни за структурата и физико-химичните свойства на серии от периленови, мероцианинови, крокониеви и скуарилиеви багрила. Теоретичните резултати са в много добро съответствие с наличните експериментални данни. Изведените молекулни характеристики (първа хиперполяризуемост, вътрешномолекулен пренос на заряд, енергетична разлика HOMO-LUMO, сила на осцилатора) определят изследваните багрила като подходящи обекти за приложение в нелинейната оптоелектроника.
- Определен е най-подходящият теоретичен подход (вариации на DFT и TDDFT методи) за изчисляване на структурни и спектроскопски параметри на различни класове багрила с приложение като донорни компоненти във фотоволтаични устройства. Убедително е показано, че прилагането на подхода позволява провеждането на предварителен скрийнинг на багрила-потенциални донорни системи, което спестява разходи за синтез и експериментално охарактеризиране на техните свойства.

По направление II:

- Молекулно-орбитални изчисления са използвани за изследване на пълния набор от възможни тавтомерни форми (в основно и първо възбудено

синглетно състояние) на новосинтезираното съединение 3,6-бис(4,5-дихидроксиоксазо-2-ил)бензен-1,2-диол. С помощта на теоретичните изследвания е потвърден и изяснен механизмът на двоен пренос на протон във възбудено синглетно състояние, което е от определящо значение при използване на съответните съединения като фотостабилизатори, лазерни багрила и сензори за метални йони.

- Проведените квантово-химични изчисления демонстрират, че с тяхна помощ може да бъде предсказано поведението на сложна тавтомерна система под влияние на статично външно електрично поле: Промените в силата и посоката на външното електрично поле предизвикват стабилизиране на различни тавтомерни форми. По такъв начин, чрез управление на характеристиките на външното електрично поле, може да се манипулира тавтомерното равновесие в дадената система.

По направление III:

- Квантово-химични изчисления са използвани за охарактеризиране на геометрията и електронната структура на серия монометин цианинови багрила (потенциални биомаркери за ДНК). Установени са зависимости между химическия характер на заместителя и промените в оптичните свойства на багрилата.
- С помощта на теоретични методи са изследвани процесите на димеризация на метин-цианиновите багрила, което позволява извличане на информация относно структурата и свойствата на образуващите се в разтвор агрегати. Сравнението между експериментални и теоретични спектрални данни показва, че в разтвор багрилото съществува под формата на смес мономер – димер.

По направление IV:

- Широко разнообразие от квантово-химични методи (B3LYP, X3LYP, OLYP, B3PW91, LC-BLYP, B2PLYP и mPW2PLYP) в комбинация с експериментални техники е използван за изследване на физико-химичните аспекти на процеси, протичащи в разтвор (главно тавтомерни и конформационни превръщания). Изследвано е влиянието на разтворителя върху конформационното/тавтомерно равновесие, както и върху реакционната способност на изследваните органични молекули. В редица статии изчислени ^{13}C химични отмествания са използвани за решаване на структурни или спектрални проблеми.

6.2. Работа със студенти

През годините гл. ас. Ангелова активно се включва в програми за обучение на студенти. Тя е ментор на студенти по програма „Студентски практики“, където е ръководила повече от 50 студенти (от СУ и ХТМУ), обучавани в направления „Изчислителна химия“, „Дизайн на нови молекули/материали“ и „Приложна изчислителна химия“. В резултат на практическото обучение студентите са задълбочили интереса си към изчислителната химия и това е довело до осъществяване на научни изследвания в рамките на и/или след приключване на практиките, до представяне на получените резултати на конференции, разработване на дипломни работи и публикуване в престижни научни списания. Съръководител (съвместно с колеги от ВУЗ) на 8 защитили дипломанти в периода 2014 г. - 2019 г. (ОКС „Бакалавър“ – 4; ОКС „Магистър“ – 4).

7. Заключение

Представените от кандидата публикации са по темата на конкурса и представляват оригинални научни разработки със значителен принос в областта на теоретичната физикохимия. Приложените материали ми дават основание да смятам, че кандидатът е изявен учен в своята област с дълбоки познания и практически умения в прилагането на широк спектър от теоретични подходи за охарактеризиране на органични и биоорганични съединения и реакционни процеси. Получените резултати носят иновативен характер и принадлежат към категорията новости в научното дирене. Дават база за по-нататъшни изследвания в областта на теоретичното моделиране на системи от интерес за електрониката, фотониката, биомаркирането и сензориката. Кандидатът демонстрира творческо мислене и зрялост при подбора на задачи от значимост за науката и практиката. В заключение, в резултат на гореизложеното, считам убедено, че със своята научно-педагогическа дейност гл. ас. д-р Силвия Ангелова напълно отговаря на всички изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност „Доцент“.

Във връзка с посоченото по-горе, предлагам гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова да бъде избрана за „Доцент“ по професионално направление 4.2 Химически науки, научна специалност „Физикохимия“ за нуждите на Института по оптически материали и технологии, БАН.

25.08.2019 г.

Рецензент:

/проф. Тодор Дудев/

Заличено на основание чл. 4,
т. 1 от Регл. (ЕС) 2016/679