

СТАНОВИЩЕ

по конкурс за заемане на академичната длъжност „ДОЦЕНТ“

по професионално направление 4.2 „Химически науки“, специалност „Физикохимия“, обявен в ДВ бр. 41/21.05.2019 г., от Института по оптически материали и технологии (ИОМТ) „акад. Й. Малиновски“, Българска Академия на Науките,

с единствен кандидат гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова

Член на научно жури: проф. дн Никола Малиновски – ИОМТ, БАН

1. Обща характеристика на представените материали

Цялостната научна продукция на единствения кандидат за конкурса гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова включва 62 работи. В конкурса тя участва с 28 публикации, които са различни от трудовете, включени в дисертацията за придобиване на образователната и научна степен „доктор“. Те са публикувани в реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни научни издания, в областта на теоретичната химия и материалознанието, като всички са в съавторство.

Научните трудове за участие в конкурса са групирани в две групи: като равностойни на хабилитационен труд са представени 14 броя публикации, 2 от които са публикувани в реферирани и индексирани в базите данни Web of Science и Scopus списания с ранг Q1 (J. Phys. Chem. C и Beilstein J. Org. Chem.), 4 – в списание с ранг Q2 (ChemPhysLett., Comput. Theor. Chem., Color. Technol., Aust. J. Chem.), 2 – в списание с ранг Q3 (Journal of Physics: Conference Series), 4 – в списание с ранг Q4 (Bulg. Chem. Commun.) и 2 – в реферирано списание без IF или SJR (Nanoscience & Nanotechnology: Nanostructured materials application and innovation transfer). Съгласно Правилника за приложение на ЗРАСРБ и Правилника на ИОМТ – БАН, тези публикации събират общо 208 точки при минимални изисквани 100 точки по съответната група показатели.

Извън хабилитационния труд са представени 14 статии в реферирани и индексирани във Web of Science и Scopus издания, от които 5 са публикувани в списания с ранг Q1 (Tetrahedron, Phys. Chem. A, J. Alloys Compd., Dyes Pigm.), 5 – в списание с ранг Q2 (J. Chem. Res., J. Mol. Struct., Acta Cryst. E), 3 – в издания с ранг Q3 (Struct. Chem., Arkivoc, J. Struct. Chem.,) и 1 в издания с ранг Q4 (Bulg. Chem. Commun.). Те събират общо 282 точки при минимални изисквани 220 точки по тази група показатели съгласно Правилника на ИОМТ – БАН.

В предоставената от д-р Силвия Ангелова справка се представени общо 101 цитирания, отразени в базите данни Web of Science и Scopus, което е добър атестат за нивото на научните изследвания и за актуалността на тематичните направления, в които тя работи. От тях 37 цитата са отбелязани за 7 от статиите, приравнени на хабилитационен труд, и 64 цитата на 8 публикации извън хабилитационния труд. Те събират 196 точки при изисквани минимални 60 точки по този показател съгласно Правилника на ИОМТ – БАН.

Направеният анализ на постигнатите от кандидата наукометрични показатели показва пълно съответствие и надвишаване на изискванията за заемане на академичната длъжност доцент, заложили в Правилника на ИОМТ – БАН.

В допълнение, гл. ас. д-р Силвия Ангелова е участвала в изпълнението 5 проекта, финансирани от Фонд Научни изследвания, от които 3 са текущи и 6 проекта по различни национални и международни програми с швейцарската национална научна фондация, полската, руската и македонска академии на науките, CNR Италия.

Отлично впечатление прави приложената информация за разпространението на резултати от изследванията на кандидата, от която е видно, че д-р Ангелова е изнесла 10 устни доклади и 33 постерни доклада на международни и национални научни форуми. Трябва да се отбележи, че тя е била ръководител на 8 дипломанта, 2 специализанта и

многобройни студентски практики, което е доказателство и за нейната активна педагогическа дейност.

2. Оценка на научно-изследователската дейност на кандидата.

Основен обект на изследване в публикациите на кандидата в областта на теоретичната химия е електронната структура на молекулите и произтичащите от нея физикохимични свойства. Квантово-химичните (*ab initio* и DFT) методи са използвани също така за изследване на междумолекулни взаимодействия и оценка на относителните термодинамични параметри на различни химични и биологични (чрез използване на моделни реакции) обекти и реакции на микроскопско ниво.

Основните научни приноси в публикациите, представени вместо хабилитационен труд, могат да се опишат като приложения на квантово-химичните изчисления за изучаване на електронната структура в основно състояние и свойствата на багрила за фотоволтаични приложения и на флуоресцентни багрила – биомаркери, както и изучаване на електронната структура в основно и възбудено състояние на тавтомерни системи.

Друга основна част от научните изследвания на кандидата са посветени на теоретични методи или комбинация от теоретични методи (DFT, HF, post-HF: MP2 и CCSD(T)) и една или повече експериментални техники за решаване на структурни и/или спектроскопски проблеми и предсказване на молекулни свойства. При квантово-химичните изчисления е използван широк набор DFT функционали: както популярният B3LYP, X3LYP, OLYP, B3PW91, LC-BLYP, B2PLYP и mPW2PLYP. В редица публикации за решаването на структурен или спектроскопски проблем са използвани изчислени ¹³C химични отмествания, което е своеобразно продължение на тематиката, на която е посветена дисертацията за ОНС „доктор“, а именно използването на квантово-химично изчислени ЯМР параметри като средство за изследване на тавтомерни и конформационни равновесия.

Приносите бих характеризирал като обогатяване на съществуващи знания по проблемите, върху които работи кандидатът, чрез използване на теоретични методи за оптимизиране на свойствата на известни материали и структури, както и за създаване на нови такива. Считаю, че тези изследвания са важни за практическото използване на изучаваните материали и структури.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Цялостната научно-изследователска дейност на д-р Силвия Ангелова показва, че тя е изследовател със задълбочени познания и опит в приложението на квантово-химичните методи за изследване на междумолекулни взаимодействия и оценка на относителните термодинамични параметри на различни химични и биологични обекти и реакции на микроскопско ниво. Въз основа на прегледа на документите по конкурса, вземайки под внимание оценката на представените публикации и значимостта на научните приноси, както и личните ми впечатления за качествата на кандидата, изразявам положително становище и препоръчвам на уважаемите членове на Научния съвет на ИОМТ – БАН да изберат д-р **Силвия Емилова Ангелова** за „ДОЦЕНТ“ в ИОМТ – БАН.

10.09.2019 г.

Изготвил становището:

/проф. дн Н.Малиновски/