

СТ А Н О В И Щ Е

по конкурс за доцент по

4.2. Химически науки (Физикохимия)

обявен в ДВ, брой 41 от 21 май 2019 г.

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

В конкурса за доцент към Института по Оптически Материали и Технологии „Акад. Й. Малиновски“ при БАН, София участва един кандидат – гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова. Силвия Ангелова е завършила Химическия факултет на СУ “Св. Климент Охридски” със специализация „Органична и аналитична химия“ през 1995г. През 2009 г. защитава дисертация за придобиване на научната и образователна степен Доктор по „Теоретична химия“ на тема „Квантово-химично изчислените ЯМР параметри като средство за изследване на тавтомерни и конформационни равновесия” в Института по Органична Химия с Център по Фитохимия при БАН. От 2000 до 2011 г. Силвия Ангелова е работила като химик в лабораторията по ЯМР спектроскопия, а след това и като изследовател в областта на изчислителната химия (строеж на веществото, химическа термодинамика, спектроскопия) в същия институт. От 2011 г. до сега заема длъжността главен асистент.

Научната дейност на гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова обхваща общо 62 статии и 3 глави от книги, 52 от които са публикувани в международни списания с импакт фактор. В конкурса кандидатът участва с 14 публикации разделени, според изискванията на закона в две групи. Според представената справка по тях са забелязани 34 цитата. Проверката ми в Web of Knowledge и Scopus, с изключване на автоцитиранията, върна практически същите резултати. Д-р Ангелова е участвала както в национални, така и в международни проекти. Тя има и участия в повече от петдесет национални и международни конференции.

Изследванията на д-р Ангелова, включени като публикации в настоящия конкурс, са насочени главно към приложенията на квантово-химичните изчисления за изследване на

структурата и свойствата на молекулни системи от групата на периленовите, мероцианиновите, скуарилиеви и крокониеви багрила и тяхното потенциално приложение като основи на фотоволтаични клетки, материали за оптоелектрониката или функционални материали. Поради тяхната хиперполяризуемост и техните солватохромни свойства тези багрила представляват интерес за областите на приложение, в който се изискват нелинейни оптични свойства. Изследванията са насочени, както към търсене на класически за този тип пресмятания като пресмятане на HOMO и LUMO орбиталите и разликите между тях, така и към методичното развитие DFT и TDDFT методите по отношение на транспорта на електронна плътност, реорганизационната енергия λ и енергия на свързване на екситон. Интерес представляват и приложенията квантово-химичните изчисления за изучаване на електронната структура в основно и възбудено състояние на тавтомерни системи. Д-р Ангелова е използвала изчисления и е потвърдила и изяснила механизъм на двоен пренос на протон във възбудено синглетно състояние, което е значително предизвикателство за изчислителната химия и има голямо практическо приложение в области като фотосенсибилизацията, сензорната химия на металните комплекси и лазерните багрила.

Представените научни публикации показват, че гл. ас д-р Ангелова е утвърден учен с богат и разнообразен професионален опит, развиващ се в едно изключително интересно научно направление.

В заключение, считам че гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова отговаря на всички изисквания на закона за заемане на академичната длъжност Доцент. Тя е изграден специалист в областта на квантовите пресмятания, теоретичната химия и изчислителната химия. Въз основа на гореизложеното предлагам гл. ас. д-р Силвия Емилова Ангелова да бъде избрана за Доцент в Института по Оптически Материали и Технологии „Акад. Й. Малиновски“ при БАН.

София,

Изготвил становището:

7.09.2019

доц. Д-р Веселин Петров