

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дн Ивайла Недялкова Панчева-Кадрева
във връзка с конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“,
област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика,
професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия)
за нуждите на Института по Оптически Материали и Технологии (ИОМТ)
“Акад. Йордан Малиновски”
при Българска Академия на Науките

Единствен кандидат за обявения в ДВ (бр. 24 от 21.03.2025 г.) конкурс за академичната длъжност „професор“ е доц. д-р Силвия Емилова Ангелова от лаборатория "Оптична метрология" при ИОМТ-БАН. Съгласно нормативните изисквания д-р Ангелова е представила в електронен вариант необходимата информация и е допусната до участие в процедурата.

1. Кратко представяне на кандидата

1.1. Образование: Силвия Ангелова завършва висшето си образование по химия в СУ „Св. Кл. Охридски“ – Химически факултет (сега Факултет по химия и фармация) и през 2009 г. придобива ОНС „доктор“ по теоретична химия със защита на дисертационен труд на тема „Квантово-химично изчислените ЯМР параметри като средство за изследване на тавтомерни и конформационни превръщания“ с ръководител дхн Венелин Енчев. Преминава СДК по Бизнес мениджмънт и маркетинг (УНСС, 1990-1995) и е експерт по европейско техническо законодателство, безопасност и контрол на качеството на индустриални продукти.

1.2. Трудов стаж: Основният трудов стаж на С. Ангелова е в два института на БАН: Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ) – химик (1996-2005); научен сътрудник (2005-2011), асистент/гл. асистент (2013-2019); ИОМТ – доцент (от 2019 г. досега). От 2022 г. е научен секретар на ИОМТ.

2. Научноизследователска и учебна дейност на кандидата

Доц. д-р Силвия Ангелова е съавтор на общо над 110 публикации, 101 от които се откриват в базата данни Scopus и 95 – в Web of Science. След заемане на АД „доцент“ през 2019 г., С. Ангелова участва в авторските колективи на 46 научни пълнотекстови съобщения (Scopus). Към настоящия момент д-р Ангелова е ръководител на 1 действащ проект и е член на научни колективи, участващи в реализацията на 4 текущи и 14 приключили проекти, финансирани по различни програми на ФНИ и БАН. В периода

2020-2025 г. С. Ангелова е участвала в работата на 20 научни форуми с общо 31 научни разработки (19 доклада и 12 постерни съобщения). Била е съръководител на 16 дипломанти (2014-2024 г.) и е лектор на спецкурс в Центъра за обучение на докторанти към БАН.

3. Оценка на материалите за участие в конкурса за АД „професор“ и съответствието им според действащото в РБългария законодателство

3.1. Общо представяне

В конкурса д-р Ангелова участва общо с 19 разработки. Според действащите критерии съгласно ЗРАСРБ и Правилника за неговото прилагане съобщенията в пълен текст са разпределени както следва: Q1 – 11 (275 т.); Q2 – 6 (120 т.); Q3 – 1 (15 т.) (Scimago Journal & Country Rank).

3.2. Изпълнение от кандидата на изискванията по групи

Показател А (50 т.): Кандидатът е защитил дисертационен труд за присъждане на ОНС „доктор“ (Диплома № 33406 / 20.07.2009 г.).

Показател В (165 т.): Д-р Ангелова представя 7 научни публикации, еквивалентни на хабилитационен труд, които не повтарят материалите по други конкурси за заемане на АД и придобиване на НС. Пет от публикациите са в списания в първи квартал и две – във втори. Общият брой точки покрива и значително надвишава минималните национални изисквания и тези на ИОМТ-БАН за придобиване на АД „професор“.

Показател Г (245 т.): По групата от показатели Г доц. Ангелова участва с 12 научни публикации (Q1 – 6; Q2 – 4; Q3 – 1; 1 без SJR/Q). Научните съобщения са с качество, отговарящо на утвърдените критерии.

Показател Д (170 т.): Д-р Ангелова е представила списък с 85 цитата, с което изпълнява изискванията на национално ниво и заложените в Правилника на ИОМТ-БАН.

Показател Е (150 т.): Доц. Силвия Ангелова е участвала в изпълнението на 13 национални и 1 международен научни проекти, с което отговаря на националните и институционални критерии.

Дадената дотук информация относно изпълнението на различните показатели за заемане на АД „професор“ в ИОМТ-БАН по професионално направление 4.2. „Химически науки“ (Физикохимия) показва, че кандидатът притежава качества да извършва научноизследователска дейност.

3.3. Изследвания на кандидата

По същество приемам авторската справка за приносите на кандидата. Силвия Ангелова провежда фундаментални изследвания в сферата на съвременното материалознание, свързани с изясняване на съществуващи процеси чрез нови експериментални и теоретични протоколи и с изследване на физикохимичните свойства на известни и нови съединения. Макар, че част от обектите в нейните научни публикации могат да се причислят към „допирни“ области на научното познание, основните приноси на кандидата се отнасят към две основни научни направления – органична и координационна химия.

3.3.1. Структура и свойства на органични съединения

В част от представените трудове д-р Ангелова изследва процеси на изомеризация, тавтомеризация и/или агрегация на разнообразни молекулни системи: кумаринови производни [15], аминобензоимидазол [19], нафталени [43, 105], молекулни превключватели на базата на хидразони [58, 75], модифицирани коронни етери, съдържащи и багрила [60], антиоксиданти и техни синтетични аналози [73]. Обект на структурни изследвания са серия от 1,8-нафталимиди самостоятелно или като сензорна част в структурата на полимери и дендримери [68, 69], както и заредени хромофори с потенциални нелинейни оптични свойства [85].

3.3.2. Координационна химия

Съчетано с изследване на структурата и физикохимичните характеристики на органични съединения, кандидатът проявява интерес и към координационната химия в нейните разнообразни варианти от „класически“ комплексни съединения през взаимодействия от типа „домакин-гост“ до моделни системи, обект на съвременната бионеорганична химия. Изследваните системи включват циклодекстрини – метални катиони от групи 1-3 [40, 109], коронни етери – метални йони от групи 1-2 [59], АСЕ-инхибитори [70], родамин – пиразол – Cu(II) [84], производни на 1,8-нафталимид с йони на Mg(II), Fe(III) [97], Hg(II) [100], комплекси между багрила и кукурбит[7]урил [104].

3.3.3. Хабилизационен труд

Доц. Ангелова провежда широк спектър от изследвания, които показват възможностите за приложение на квантово-химични изчисления на различни нива на познание според особеностите на изследваните системи. В синхрон с представените материали са и публикациите, обобщени като хабилизационен труд (пок. В), които отразяват вече коментираните интереси на кандидата. Тук много добро впечатление прави уводната част на авторската справка, която е насочена към основополагащи въпроси, които показват необходимостта от съчетаване на експерименталните изследвания с теоретични разработки.

3.3.4. Методология

Д-р Силвия Ангелова използва набор от изчислителни протоколи, като тяхното разнообразие се налага не само от природата на съединенията и средата, в която са изучавани, но и от експерименталните методи, използвани за тяхното охарактеризиране. Основни DFT функционали са B3LYP, M06, M062X, MN12-SX и др., а ефектът на разтворителя е отчетен чрез PCM (Polarizable Continuum Model) и SMD (Solvation Model based on Density). Предсказани са различни характеристики на база проведените изчисления – енергии на HOMO/LUMO орбитали, заряди, термодинамични параметри (енталпия, енергия на Гибс), УВ-спектри, химични отмествания и др.

В по-голямата си част (12 бр., 60%) публикациите за участие в конкурса представляват експериментални изследвания, умело съчетани с подходящи квантово-химични изчисления. Шест научни съобщения обобщават резултатите от самостоятелни теоретични разработки, и едно е обзорна статия, съдържаща собствени резултати и такива от други автори.

3.3.5. Качество на научната продукция

Доц. д-р С. Ангелова публикува в специализирани издания, които напълно отговарят на изследваните обекти: Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry, Dyes and Pigments, Sensors, Beilstein Journal of Organic Chemistry, Physical Chemistry Chemical Physics, Inorganics, Inorganica Chimica Acta, Molecules, ChemPhysChem и др. Импакт факторът (IF) варира от 2.3 до 7.0, със среден IF 3.4 на публикациите в конкурса.

Авторските колективи включват колеги от Институты на БАН, Университети в страната (СУ, МУ), екипи от Италия, Русия, Германия, Дания, Египет, Белгия, Испания. В една публикация доц. Ангелова е единствен автор, в останалите колективите варират между 3 и 13 съавтори, което показва умението на кандидата да работи в екип с добра комуникация между изследователските групи. Силвия е автор за кореспонденция в 45% от представените научни съобщения.

Индексът на Хирш за цялостната продукция на С. Ангелова е 13 (с изключени самоцитирания на всички автори), отразяващ актуалността и значимостта на провежданите изследвания, оценени от научната общност.

4. Научни приноси на кандидата

В представените публикации Силвия Ангелова е с основен принос в планирането, провеждането и интерпретирането на теоретичните изчисления. Освен споменатия вече фундаментален характер на повечето разработки, част от изследваните системи показват и потенциал за приложение като хемосензори, молекулни превключватели, нелинейни оптични средства и др.

4.1. Публикации, равностойни на хабилитационен труд

Публикациите по пок. В могат да се разделят на три основни групи:

- хемосензори на основата на 1,8-нафталимид и родамин-пиразоли;
- „домакин-гост“ комплекси между багрила и кукурбит[7]урил;
- D-A⁺ хромофори за приложение в нелинейната оптика.

Основни приноси:

4.1.1. Синтезирани са нови производни на 1,8-нафталимид, чиято геометрия, електронна структура и ефект на разтворителя върху абсорбцията им са изследвани с методите на DFT / TD-DFT. Моделирани са координационни съединения с цел обясняване на наблюдаваните фотофизични характеристики и/или селективната сензорна способност под влияние на метални йони (Mg(II), Fe(III), Hg(II) и др.). След доказване на сензорна активност, някои от новополучените багрила са използвани за получаване на флуоресцентни съполимери със стирен.

4.1.2. Съществен принос в химията на 1,8-нафталимидите е включването им в дендримери от различни генерации (на основата на PPA, PAMAM), при което се получават нови такива с интересни свойства. Поради големия размер на тези системи е моделиран фрагмент, чиято геометрия е оптимизирана. Разгледана е възможността за участие във водородни връзки с разтворителя метанол, които са определящи за пространствената структура на дендримера.

4.1.3. Синтезиран е хемосензор на основата на родамин и пиразол, като геометрията на флуоресцентната и неактивната му форми е оптимизирана с теоретични подходи. Моделирани са координационни съединения с йони на Cu(II) при различни молни отношения на реагентите и е оценена способността на различни функционални групи да участват в образуването на комплексни видове.

4.1.4. Изследвана е способността на кукурбит[7]урил (CB[7]) да се използва като твърда матрица за включването на определени фрагменти от структурно различни багрила и/или полимери в неговата кухина. Оценени са термодинамично благоприятното образуване на „домакин-гост“ комплекси и възможността за проектиране на супрамолекулни полимерни хидрогелове на основата на багрила и CB[7].

4.1.5. Синтезирани са системи, съдържащи донорен (D, N-хетероцикли) и акцепторен (A, азониев катион) фрагменти, които са свързани директно без наличието на спрегната система между тях. Електронната структура, линейните и нелинейните оптични свойства на съединенията, както и влиянието на заместители върху тях, са изследвани чрез теоретични подходи. Резултат от съчетаването на теория с експеримент е създаването на обещаваща стратегия за проектиране на директно свързани D-A органични хромофори с приложение в нелинейната оптика.

4.2. Публикации извън хабилитационния труд

Публикациите по пок. Г илюстрират широк кръг от научна проблематика, която може да бъде решена чрез подходяща комбинация от експериментални и/или теоретични изследвания. По-долу са представени основни приноси на кандидата в областта на явления, свързани с обекти от органичната и бионеорганичната химия.

4.2.1. Оценени са основните фактори, отговорни за взаимодействието на α -, β , γ -циклодекстрини с метални йони от групи 1-3 (DFT/PCM изследване). Установено е, че малкият размер на металните йони, съчетан с висок заряд, благоприятства комплексобразуването. В същата посока влияе наличието на газова фаза или среда с ниска полярност.

4.2.2. Чрез DFT е показано, че металните йони от групи 1-2 с малък йонен радиус са предпочитани централни йони в термодинамично стабилните комплекси с коронни етери, съдържащи шифови бази. Тези комплексни частици се образуват основно в ацетонитрил, докато координацията на останалите катиони е предпочитана в газова фаза.

4.2.3. Синтезирани са нови стирилови багрила, съдържащи коронни етери, които проявяват по-висока степен на транс-цис фотоизомеризация и притежават по-дълго живущи по-високоенергетични форми в сравнение с техни аналози. С метода на DFT е предсказана енталпията на двата изомера и възможността за съхранение на енергия чрез изследваните системи.

4.2.4. Оценена е способността на антихипертензивните лекарствени средства каптоприл и лизиноприл да взаимодействат с Zn(II)-съдържащия фрагмент (HEXXN) на ангиотензин-превръщащия ензим (ACE), което води до техния инхибиращ ефект и използването им като антихипертензивни агенти. Резултатите са сравнени с тези за трипептида Val-Pro-Pro, изолиран от мляко, който показва значително по-слаб афинитет към фрагмента Zn-HEXXN на ACE.

Посочените приноси по публикациите извън хабилитационния труд на Силвия Ангелова са представителна извадка на нейните усилия в решаването на разнообразни научни въпроси и не омаловажават постигнатото от нея в останалите съобщения по пок. Г за участие в конкурса.

В обобщение, научноизследователската дейност на кандидата е насочена към използване на съвременни и адекватни теоретични модели за обясняване на свойствата на материята, а в някои случаи – и за тяхното предсказване. Представените разработки са част от значителната проектна дейност на Силвия, а участието ѝ като съ-ръководител на множество дипломанти показва умението ѝ да насочва и подпомага студентите в тяхната научна работа. Постигнатите резултати в областта на органичната / координационна

химия и съответните приноси отговарят на условията на конкурса за заемане на АД „професор“.

5. Въпрос към кандидата

Убедена съм, че съвременните тенденции в развитието на изчислителните протоколи водят до разработването на методи, които са в достатъчно добър синхрон с (или предсказват) характеристиките на съединенията в техните експериментални UV-VIS, IR, NMR спектри. Проблематична област се оказва кръгово-дихроичната спектроскопия на малки молекули, богати на хирални центрове, и техните метални комплекси, където до момента теорията рядко успява да обясни експериментално наблюдаваните явления.

Моят въпрос към кандидата е (разбира се, ако е запознат с проблема, който е строго специфичен) – на какво се дължи недостатъкът на квантово-химичните изчисления при предсказване на кръгово-дихроичните характеристики на малки хирални молекули?

6. Заключителни бележки

От гледна точка на актуалните правила за придобиване на АД „професор“ научната продукция на Силвия Ангелова отговаря на изискванията, заложиени в настоящия ЗРАСРБ, в Правилника за неговото прилагане и в нормативните документи на ИОМТ-БАН. Наукометричните показатели са изпълнени и надминати съгласно критериите за професионално направление 4.2. „Химически науки“.

От гореизложеното, както и от цялостната научна и професионална дейност на кандидата, **подкрепям** избора на доц. д-р Силвия Емилова Ангелова за заемане на АД „професор“ в направление 4.2. „Химически науки“ (Физикохимия) за нуждите на Института по Оптични Материали и Технологии, БАН, и препоръчвам на Научния Съвет на ИОМТ-БАН да одобри това решение.

14 юли 2025 г.

проф. дн Ивайла Панчева-Кадрева