

РЕЦЕНЗИЯ

Вх. № 179 / 11.04.2025

от проф. д-р Даниела Богданова Карашанова,

Институт по оптически материали и технологии „акад. Йордан Малиновски“ – БАН

върху материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“, обявен в Институт по оптически материали и технологии „акад. Йордан Малиновски“ – БАН (ИОМТ-БАН) в професионално направление 4.2 Химически науки (Физикохимия).

1. Общо представяне

Със заповед № РД-15-305 от 14.05.2025 г. на Директора на ИОМТ-БАН, съм определена за член на научното жури на конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“ за нуждите на направление "Оптична метрология и холография".

В конкурса за „професор“, обявен в Държавен вестник, бр. 24 от 21.03.2025 г. като единствен кандидат се е явила доц. д-р **Силвия Емилова Ангелова**.

2. Кратки биографични данни на кандидата

Доцент д-р Силвия Ангелова завършва висшето си образование във Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Кл. Охридски“, специалност „химия“ през 1995 г. и провежда следдипломна квалификация по Бизнес мениджмънт и маркетинг в Института за следдипломна квалификация към УНСС.

Докторската си дисертация на тема „Квантово-химично изчислените ЯМР параметри като средство за изследване на тавтомерни и конформационни превръщания“ изготвя в Института по органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките (ИОХЦФ-БАН) и защитава през 2009 г. пред ВАК в професионално направление 4.2. Химически науки, специалност: Теоретична химия.

В периода от 1996 до 2019 г. доц. Ангелова работи в ИОХЦФ-БАН като заема последователно длъжностите химик, научен сътрудник, асистент и главен асистент. Провела е следдокторска специализация в Университета на Алкала, Алкала де Енарес (Мадрид), Испания от м. март 2012 г. до м. март 2013 г.

През 2019 г., след спечелен конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“, премества своята месторабота в ИОМТ-БАН, където от 2022 г. изпълнява функциите на Научен секретар и в момента ръководи група от 3 млади изследователи, работещи в областта на изчислителната химия.

Основните научно – изследователски интереси на доц. д-р Ангелова са от областта на теоретичната химия: квантова химия, изчислителна химия и молекулно моделиране.

3. Научно-изследователска дейност

А) **Цялостната научно-изследователска дейност** на доц. Силвия Ангелова обхваща съавторство в 112 публикации и една самостоятелна публикация, представени по списък. 101 от статиите могат да бъдат открити в базата данни Scopus и при направената справка й осигуряват към момента h-индекс 13 (Scopus, без самоцитирания). Част от резултатите в тези публикации са получени и в изпълнение на 19 научно-изследователски и образователни проекти, от които 7 са с Фонд „Научни

изследвания“ по конкурси за фундаментални научни изследвания, 4 са по спогодби за двустранно сътрудничество на България (ФНИ) с различни държави (Италия, Македония, Австрия, Русия), 4 са двустранни сътрудничества на БАН с различни научни институции в чужбина, 1 е по Оперативната програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, 1 е в изпълнение на Националния план за възстановяване и устойчивост, 1 е международен с Националния фонд за научни изследвания на Швейцария, а 1 е по програмата за студентски практики на МОН. Един от текущите проекти за фундаментални научни изследвания се изпълнява под ръководството на кандидата.

Б) Резултатите от научно-изследователската дейност, с които кандидатът участва в обявения конкурс за длъжността „професор“, са обобщени и описани в 19 научни публикации, всички в списания с ISI „импакт фактор“. По отношение на квантилите, 10 от публикациите са в списания с квантил Q1, 7 с Q2, 1 с Q3, 1 без квантил на списанието в годината на публикуване, което е свидетелство за високо научно ниво на изследванията, описани в тези публикации. Между списанията се открояват реномираните в областта на физикохимичните изследвания на материалите: *Physical Chemistry Chemical Physics* с $IF_{2017}=4.49$, *ChemPhysChem* с $IF_{2011}=3.412$, в областта на органичната химия и багрилата *Dyes and Pigments* с $IF_{2017}=3.767$, а също *Antioxydants* с $IF_{2021}=7.675$.

Кандидатът е първи автор в 4 публикации [19,40,58,109], последен (водещ) автор в 3 [70,104,105], автор за кореспонденция в 8 [19,58,59,60,70,73,75], а 1 публикация е самостоятелна [59].

Избраните за конкурса публикации, цитати и участия в конференции на доц. д-р Силвия Ангелова осигуряват необходимите точки, съответстващи на минималните национални изисквания, отразени в Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, както и в Правилника на ИОМТ-БАН и ги превишават в повечето от показателите. Например, по показател 4 са представени 165 т. при минимум 100 т. за участие в конкурса, по показател 7: 245 т. при минимум 220, по показател 11: 170 при минимум 120, по показатели 13 – 18: 280 при необходими 150.

Представените в настоящия конкурс публикации се различават от представените в дисертационния труд на кандидата за придобиване на ОНС „доктор“ и от тези, с които е участвала в конкурса за заемане на академичната длъжност „доцент“.

Съгласно изискванията на конкурса за академичната длъжност „професор“, представените публикации са разделени в две групи:

- I. Научни публикации, приравнени на **хабилитационен труд** (група показатели „В“, показател „4“): 7 броя (по номера от общия списък 68, 69, 84, 85, 97, 100, 104)
- II. Научни публикации извън хабилитационния труд (група показатели „Г“, показател „7“): 12 броя (по номера от общия списък 15, 19, 40, 43, 58-60, 70, 73, 75, 105, 109);

От своя страна, в тематично отношение публикациите от хабилитационната справка биха могли да се разделят в следните 3 направления, където се оформят и съответните основни приноси на кандидата, както самата тя ги представя в справката за авторските приноси:

- (1) Приложение на квантово-химичните изчисления за изучаване на електронната структура в основно състояние и свойствата на хемосензорни системи на основата на 1,8-нафталимиди и родамин [68, 69, 84, 97, 100].

В това направление е концентриран най-големия дял от публикации в хабилитационния труд. Част от тях са посветени на квантово-химични изследвания на багрила, производни на 1,8-нафталимид [68, 97, 100], които позволяват да се определи електронната им структура. Интересът към тези съединения се дължи на антибактериалните им, противогъбични, противоракови и антивирусни свойства, обуславящи техните биологични и медицински приложения. В същото време, относително ниското молекулно тегло, компактната молекула и възможността за въвеждане на активни групи, способни да участват в полимеризационни процеси, правят тези съединения подходящи за структурна модификация на полимерни материали и като фотоинициатори на свободнорадикалова полимеризация при облъчване с видима светлина. Производните на 1,8-нафталимид са изследвани като сензорни системи за откриване на катиони, аниони или неутрални замърсители, отделяни в околната среда при редица производства. Темата е тясно свързана с преодоляването на сериозни екологични проблеми и несъмнено е актуална, както от научна, така и от приложна гледна точка.

Приносният характер на отразените в това направление изследвания се състои в проведени изчисления с методите на теорията на функционала на плътността (DFT) и време-зависимия функционал на плътността (TD-DFT) на две новосинтезирани производни на 1,8-нафталимида (NI1 и NI2), които позволяват да се изследва геометрията и електронната структура на тези системи, включително влиянието на различни органични разтворители върху абсорбционните спектри, протонирането и способността на тези системи да образуват комплекси с метални катиони (по-конкретно - Mg^{2+} и Fe^{3+}) с цел да се обясни влиянието на различните метални йони върху фотофизичните характеристики [97]. Друго производно на 1,8-нафталимид (4-(4,6-diamino-1,3,5-triazin-2'-ylamino)-N-(2-dimethylaminoethyl)-1,8-naphthalimide, NI-DAT) е изследвано като сензор за Hg^{2+} [100]. И тук моделирани комплекси на моделна система, представляваща фрагмент от молекулата, с Hg^{2+} и Mg^{2+} , са използвани за обясняване на експериментално наблюдаваната селективна сензорна способност на изследваното съединение.

С помощта на изчислителните методи е изследвана и структурата на две багрила (NI3 и NI4), едното от които ново (NI3) [68], след комбиниране на сензорната активност на 1,8-нафталимидите и способността им да съполимеризират с традиционни мономерни, използвани в полимерната химия (винилови и метакрилатни мономерни) за получаване на полимери с включени в страничната верига сензорни фрагменти. Детайлно изследвани са влиянието на разтворителя върху спектралните свойства на двете съединения, разпределението на зарядите, протонирането и образуването на комплекси с метални катиони за интерпретиране на сензорната способност на двете хромофорни системи. След доказване на сензорна активност, сензорните фрагменти на базата на двата нафталимида са използвани за получаване на флуоресцентни съполимери със стирен.

Важен резултат е включването на 1,8-нафталимидите към полипропиленамин (PPA) и полиаминоамин (РАМАМ) дендримери от различни генерации, при което са получени нови флуоресцентни дендримери с уникални свойства. Поради големите размери на тези системи, при изследването на един такъв периферно модифициран с 1,8-нафталимид (3-(6-nitro-1,3-dioxo-1H-benzo[de]isoquinolin-2(3H)-yl)propanoic acid)

РАМАМ дендример (D1) [69], е моделиран фрагмент от системата, за който е оптимизирана геометрия в основно състояние и са разгледани възможни взаимодействия с експлицитни молекули разтворител (метанол), тъй като водородните връзки с молекулите на разтворителя са определящи за 3D структурата на дендримера. Установени са предпочетените места за протониране и са предсказани теоретично УВ спектрите. Съединенията са изследвани за антимикробна и цитотоксична активност в свободно състояние и след нанасяне върху повърхността на памучна тъкан.

Родаминовите багрила притежават уникални оптични свойства и са широко използвани в биотехнологични приложения (флуоресцентна микроскопия, поточна цитометрия, флуоресцентна корелационна спектроскопия и др.). За родамините е характерна интерконверсия между нефлуоресцентна и флуоресцентна форма. От друга страна, пиразолите притежават значителна хелатираща способност, което провокира синтеза на хемосензор, съдържащ двата фрагмента [84]. Оптимизирани са геометриите на двете форми на RhPzNH_2 и са моделирани комплекси с хидратирани и нехидратирани Cu^{2+} йони при стехиометрия багрило-метал 1:1 и 2:1, с позициониране на металния катион при различни лигиращи групи. При липсата на експериментални данни, потвърждаващи точното разположение на метала и структурата на комплекса, данните от молекулното моделиране са единствен източник на подобна информация. Изследвани са свойствата на съединението като молекулно логическо устройство и е установено, че действа като дигитален компаратор.

(2) Приложение на квантово-химичните изчисления за изучаване на комплекси от типа домакин-гост на багрила и кукурбит[7]урил [104]

В тази публикация се прилагат квантово-химичните изчисления за решаването на задачата за вграждане на багрила в молекула домакин и създаване на стабилни комплекси. Подбрани са 5 багрила, използвани традиционно в лазерни системи (Pyridine 1, Pyridine 2, Rhodamine 6G, Rhodamine B, Rhodamine 700) в ролята им на гост и молекула от кукурбит[7]урил [104], като домакин. По аналогия с описани в научната литература системи от типа домакин-гост, се очаква такива комплекси да проявят подобрени фотофизични свойства, повишена фотостабилност, да осигурят по-висок квантов добив на флуоресценцията и да са от интерес за моделиране и оптимизиране на флуоресцентни материали.

Тъй като кухнята на системата-домакин не е достатъчно голяма, за да навлезат в нея целите молекули на багрилата, се налага моделиране на комплекси, при които различни фрагменти от молекулите-гости са вътре в кухнята на СВ[7]. Процесът е изследван в газова фаза и при отчитане на влиянието на средата, като е използван имплицитен разтворител (CHCl_3 и DMSO). Демонстрирано е, че с помощта на квантово-химични (DFT) изчисления може да бъде предсказано взаимодействието на молекулата-домакин с молекулите на багрилата от термодинамична гледна точка. Термодинамично благоприятното включване на изследваните лазерни багрила в кухнята на СВ[7] ще се отрази на техните фотофизични свойства, като подобри фотостабилността им, да ограничи взаимодействието със средата (и евентуално гасене на флуоресценцията). Освен това ограничаването на молекулите на багрилата в кухнята на СВ[7] е вероятно да намали нерадиационните пътища на разпадане, което води до увеличаване на флуоресцентния квантов добив. Тези ефекти правят СВ[7]

привлекателен капсулиращ агент за приложения в лазерните технологии и други фотонни устройства, където се изискват стабилни и силно флуоресцентни материали. Важно е да се отбележи, че страничните вериги на полимерите също могат да бъдат включени в кухнята на CB[7] и това взаимодействие трябва да бъде отчетено при проектирането на супрамолекулни полимерни хидрогелове с помощта на кукурбитурили (CB-SPHs). Разликите в ефективността на реакциите на включване при различни ориентации на молекулите на багрилата (водещи съответно до различни начини на включване на молекулите-гости в кухнята на молекулата-домакин) показват, че е от изключителна важност да се прецени кои части от молекулата трябва да останат свободни за последващо третиране с CB[7] в случаите, когато багрилото е ковалентно свързано с полимера, за да може да се осъществи взаимодействието и да се постигне търсеният ефект. **Основен принос** на проведеното изцяло теоретичното изследване са получените полезни нови структурни данни и очертаните насоки за проектиране за супрамолекулни системи на базата на багрила и CB[7], които имат потенциално приложение в актуални и бързоразвиващи се области като фотоника и материалознание.

(3) Приложение на квантово-химичните изчисления за изучаване на електронната структура в основно състояние и свойствата на D-A+(D) хромофори за нелинейни оптични приложения [85].

Целта на това изследване е чрез третиране на халохинолизиниеви соли с N-хетероарилстанани при условията на реакция на Стиле да се получат нови заредени донорно-акцепторни (D-A+) хромофори с хинолизиниеви катиони като акцепторен фрагмент [85]. Използваният подход осигурява лесен достъп до потенциални едномерни D-A+ и двумерни D-A+-D хромофори, в които акцепторната част (A+) е азониев катион, а донорите са различни богати на π -електрони N-хетероцикли. Тези системи са генерирани чрез директно свързване на донорния и акцепторния фрагмент (без спрегната система между тях), което е необичайно за съединения, проявяващи обещаващи нелинейни оптични свойства, но въпреки липсата на линейна връзка между D- и A+, нелинейната активност не намалява, а дори се повишава. Експериментално (чрез Нупер-Rayleigh Scattering (HRS)) е установено, че някои хромофори достигат много високи стойности на първа хиперполяризуемост. Електронните структури и свойства (включително линейните и нелинейните оптични свойства) на хинолизиниевите хромофори са изследвани чрез теоретични (DFT, HF и MP2) изчисления. Теоретичните изчисления са използвани за изследване на влиянието на заместителите (и на защитните групи) в хромофорната система върху оптичните свойства на багрилата. Енергиите на HOMO и LUMO орбиталите, както и разликите между тях (HOMO-LUMO gap, HLG) са послужили за охарактеризиране на структурата. Като резултат от комбинираното експериментално и теоретично изследване е предложена обещаваща стратегия за рационално проектиране на директно свързани D-A градивни блокове за създаване на нови нелинейни оптични материали на органична основа.

II. Приноси в научните публикации извън хабилитационния труд (група показатели „Г“, показател „7“.

Дванадесетте публикации, включени в тази група, се отнасят до прилагане на изчислителни методи за изследване на структурата и свойствата на органични

съединения и комплекси. Те илюстрират широк кръг научни проблеми, за решаването на които са използвани именно изчислителни методи (самостоятелни или в комбинация с експерименти). При квантово-химичните изчисления е използван широк набор DFT функционали: B3LYP [15,19,58,59,60,70,73], M06 [58], M062X [40,58,75], MN12-SX [75], ω B97XD [105] и PBE0 за TDDFT изчисления [19,60], а в някои от случаите - повече от един DFT функционал, както и *ab initio* изчисления [19].

Изследвани са процеси на изомеризация [15,58,60], тавтомеризация [19,43,58,75], агрегация [19,105], получаване на комплекси с метални катиони, молекули вода и др. [40,59,60,70,105,109] и хомолитично разкъсване на O-H връзка [73]. 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 почти всички публикации от тази група: PCM (Polarizable Continuum Model) в публикации [19,43,58,60,75] и SMD (Solvation Model based on Density) в публикации [40,59,70,105,109].

При решаването на конкретните научни проблеми в някои от тези изследвания е било достатъчно да се оптимизира геометрията на една или повече молекули/йони, но в повечето случаи се е наложило предсказване на различни характеристики – като енергии на HOMO и LUMO орбиталите, както и разликите между тях (HOMO-LUMO gap, HLG), заряди, химични отмествания и константи на спин-спиново взаимодействие, симулиране на УВ спектри и др., пресмятане на различни термодинамични параметри (енталпия на дисоциация на връзка, енталпии и енергии на Гибс при реакции на агрегация и/или образуване на комплекс от типа домакин-гост).

Като цяло приносите на кандидата са основно в планирането и провеждането на изчисленията на електронната структура на изследваните системи и намирането на корелация с експериментални данни (ако има такива в научната литература или са измерени) за някои от свойствата им (сензорни, оптични, химични) и предсказаните от приложените изчислителни модели. Проследявани са и процеси, протичащи в изследваните системи като изомеризация, таптомеризация, комплексообразуване и др.

4. Учебно-преподавателска и експертна дейност

В съответствие със своите компетенции, доц. Силвия Ангелова води курс лекции за докторанти на тема „Компютърно моделиране на молекулна структура и оптични свойства на единични молекули и надмолекулни агрегати“ към Центъра за обучение на БАН с хорариум 30 часа. Активно участва в обучението на дипломанти, като е била съ-ръководител на 11 бакалавърски и 5 магистърски дипломни работи. Рецензент е на проектни предложения в различни конкурси на Фонд „Научни изследвания“, на подадени за печат публикации в реномирани научни списания, конкурсни процедури за присъждане на степени и заемане на академични длъжности и др.

5. Критични бележки и препоръки

Нямам критични бележки към кандидата. Единствено бих искала да направя коментар, че в справката за изпълнение на минималните изисквания, квартилите на списанията би трябвало да се определят от ранга на цитируемост на списанието по

импакт фактор (JCR-IF), а не от индекса на цитируемост (JCI). В представените от кандидата данни за повечето статии квартилите на списанията са представени спрямо импакт-фактора, но има определени квартили и спрямо индекса на цитируемост за 2 от публикациите:

№1 от хабилитационния труд - Staneva, D., Angelova, S., Grabchev, I., Spectral Characteristics and Sensor Ability of a New 1,8-Naphthalimide and Its Copolymer with Styrene. Sensors, 2020, 20, 12, 3501, DOI:<https://doi.org/10.3390/s20123501>. ISSN: 14248220, Q1 (JCI)

№6 от група Г - Angelova, S., Complexation of IA and IIA group metal ions by N-phenylaza-15-crown-5 containing Schiff bases: A DFT study, Inorganica Chimica Acta, 2019, 487, 316-321, DOI:<https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.12.041>. ISSN: 00201693, 18733255, Q1 (JCI)

За първата публикация, проверката показва, че има област, в която квартилът е Q1 и спрямо импакт-фактора, което според Правилника за прилагане на ЗРАСПБ е достатъчно тя да получи 25 т., но за втората, квартилът по импакт-фактор е Q2 за годината на публикуване 2019 г. и точките за тази публикация би трябвало да са 20, с което общият брой точки по показател Г ще стане 240, вместо 245, но пак ще надхвърли минималния праг от 220 т.

Като имам предвид интересните, значими и полезни резултати от изчислителните методи и теоретични пресмятания, отразени в представените в конкурса публикации, пожелавам на доц. Ангелова да продължава да работи все така задълбочено и упорито в областта си на квалификация и да развива своите досегашни, а и нови сътрудничества с различни изследователски групи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените от кандидата в конкурса, **доц. д-р Силвия Емилова Ангелова** документи и материали отговарят напълно на изискванията в Закона за развитие на академичния състав в Република България, Правилника за прилагането му и съответните Правилници на БАН и на ИОМТ, както и на темата на обявения конкурс за „професор”.

Като оценявам високо приносите на представените в конкурса трудове и дейности, **напълно убедено давам положителна оценка** и препоръчвам на почитаемите членове на Научното жури да изготвят доклад с предложение до Научния съвет на ИОМТ, доц. д-р Силвия Емилова Ангелова да бъде избрана на академичната длъжност „професор” по професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия) в Института по оптически материали и технологии – БАН.

11.07.2025 г.

Изготвил рецензията:

проф. д-р Даниела Карашанова