

СТАНОВИЩЕ

За конкурс за заемане на академичната длъжност „Професор“ в професионално направление 4.2. „Химически науки“, научна специалност „Физикохимия“, съгласно обявата в ДВ бр. 24 от 21.03.2025 г.

От доц. д-р Биляна Чавдарова Георгиева, Институт по оптически материали и технологии „Акад. Йордан Малиновски“ – Българска академия на науките, определена за член на Научното жури, със заповед на директора на ИОМТ №РД-15305/14.05.2025 г.

Кандидат: доц. д-р Силвия Емилова Ангелова, Институт по оптически материали и технологии „Акад. Йордан Малиновски“ – Българска академия на науките

1. Обща характеристика на представените материали

Единственият кандидат, доц. д-р Силвия Ангелова, участва в конкурса с 19 публикации, разделени на две групи, като в първата група са включени 7 публикации, приравнени на хабилитационен труд (група показатели „В“), които носят 165 точки от минимум 100, според изискванията на Правилника за приложение на ЗРАСРБ при процедура за заемане на академичната длъжност „професор“, а във втората група (група показатели „Г“) са включени 12 публикации, които носят 245 точки от минимум 220, според същите изисквания. Всичките 19 броя публикации са различни от публикациите, с които доц. Ангелова е придобила образователната и научна степен „доктор“ и с които е участвала в конкурса за академичната длъжност „доцент“. Публикациите от група „В“, приравнени на хабилитационен труд, са в списания с импакт фактор и квартили Q1 (5 броя) и Q2 (2 броя), като всички са публикувани в периода 2020-2024 г. Публикациите в група „Г“ са също в списания с импакт фактор, с изключение на една. Квартилите са следните, според доц. Ангелова: Q1 (6 публикации), Q2 (4 публикации) и Q3 (1 публикация), като периодът на публикуване е от 2009 г. до 2025 г. При проверка на информацията в Приложение 3-5, установих една малка неточност. Една от статиите (№6 от група Г) е отбелязана с Q1. Списанието *Inorganica Chimica Acta*, в което е публикувана разглежданата статия, е било класифицирано в квартил Q2 според Journal Citation Reports-IF. Разбира се, фактът, че разглежданата статия е публикувана в списание от втори квартил (Q2), по никакъв начин не компрометира нейната научна стойност, а съответстващият ѝ по-нисък брой точки не оказва влияние върху крайния резултат, като доц. Ангелова продължава да покрива минималните изисквания за заемане на академичната длъжност „професор“.

По останалите показатели, доц. д-р Ангелова също отговаря на минималните изисквания на Правилника за приложение на ЗРАСРБ при процедура за заемане на академичната длъжност „професор – група А – 50 т. (мин. 50 т.), група Д – 170 т. (мин. 120 т.), група Е – 280 т. (мин. 150 т.). Следва да отбележа, че част от посочените данни в група Е, относно участие в научни проекти и привлечени финансови средства, се отнасят до все още текущи проекти, поради което към момента не могат да бъдат отчитани като завършен академичен принос. Разбира се, тази корекция не влияе на крайния резултат, тъй като минималните изисквания са покрити.

След справка в Scopus, се вижда, че доц. Ангелова има 101 публикации, над 800 цитати и h-фактор 13.

2. Обща характеристика на научната, педагогическата и административната дейност на кандидата

Доц. д-р Силвия Ангелова работи в областта на теоретичната химия, като основно научните резултати от нейната работа са с фундаментален характер и допринасят за разбирането на свойствата на материята и връзката със структурата. В нейната работа тя използва *ab initio* и DFT методи за да изследва междумолекулни взаимодействия и да направи оценка на относителните термодинамични параметри на различни химични обекти и реакции.

По отношение на педагогическата дейност, доц. Ангелова води курс на тема: „Компютърно моделиране на молекулна структура и оптични свойства на единични молекули и надмолекулни агрегати“ към Центъра за обучение към БАН и е участвала в ръководството на 16 дипломанти от ФХФ-СУ „Кл. Охридски“ и ХТМУ-София. Тя притежава и сериозен административен опит - от 2022 г. е научен секретар на ИОМТ-БАН.

3. Научно-изследователска дейност и приноси на кандидата

Приносите в публикациите, еквивалентни на хабилизационен труд, са разделени тематично на три основни групи – **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; **2.** Приложение на квантово-химичните изчисления за изучаване на комплекси от типа домакин-гост на багрила и кукурбит[7]урил; и **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. Във всички публикации, д-р Ангелова е планирала и осъществила теоретичните изчисления, интерпретирала е получените резултати и е участвала при интерпретиране на експерименталните резултати (където има такива).

Научните приноси на публикациите в група Г са свързани с *„прилагане на изчислителните методи“*, с които работи д-р Ангелова, *„за изследване на структурата и свойствата на различни органични съединения и комплекси“*. Вижда се, че публикациите са подбрани така, че да илюстрират широк кръг научни проблеми, за чието решение д-р Ангелова използва широк набор от функционали в рамките на TD DFT изчисления, като демонстрира задълбочено разбиране в областта на теоретичната химия — от популярния и утвърден B3LYP, през по-съвременни и точни подходи като M06, M06-2X и PBE0, до по-сложни и ресурсоемки функционали от типа на ω B97XD и MN12-SX.

4. Заключение

Като заключение, доц. д-р Ангелова отговаря напълно на изискванията на ЗРАСРБ и на правилника на ИОМТ-БАН за неговото прилагане. Наличните наукометрични показатели, включително и h-индекс 13, свидетелстват за високото качество на нейните научни публикации и потвърждава съществуващия ѝ принос към изследователската област, в която е избрала да работи.

След всичко гореизложено, давам положителна оценка и препоръчвам на почитаемото Научно жури да подкрепи кандидатурата и да предложи на Научния съвет на ИОМТ-БАН да присъди на доц. д-р Силвия Ангелова академичната длъжност „професор“ в професионално направление 4.2. Химически науки“.

Дата: 14.07.2025 г.

Изготвил:

Доц. д-р Биляна Георгиева