

СТАНОВИЩЕ

по конкурс за заемане на академичната длъжност **"Професор"** по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Физикохимия” съгласно обява в ДВ № 24/21.03.2025 г.

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

Член на научното жури: доц. д-р Татяна Куцарова, Институт по електроника, Българска академия на науките

1. *Обща характеристика на представените материали:* Доц. д-р Силвия Ангелова – единствен кандидат по конкурса, е завършила СУ "Св. Климент Охридски", Химически факултет. Притежава ОНС „доктор“ - тема на дисертационен труд: „Квантово-химично изчислените ЯМР параметри като средство за изследване на тавтомерни и конформационни превръщания“. В момента заема академичната длъжност „Доцент“ и има административен опит като научен секретар на ИОМТ-БАН. По показател В - хабилитационен труд – научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация, кандидатът участва в конкурса със 7 публикации в реферирани международни издания и притежаващи импакт фактор (Web of Science; Scopus), от които 5 попадащи в квантил Q1 и 2 в квантил Q2. По този показател точките са 165. По показател Г7 са представени 12 публикации в реферирани международни издания (Web of Science; Scopus), от които 6 попадащи в квантил Q1, 4 в квантил Q2, 1 в квантил Q3 и 1 в издание без SJR/IF. По този показател сумата от точките е 245. По показател Д11 са представени 85 независими цитирания на 10 научни публикации, което говори за широк отзвук и признание от научната общественост. По този показател сумата от точките е 170 при минимум 120 точки. По показател Е доц. д-р С. Ангелова е представила списък на проектите с нейно участие и привлечените средства по тях (280 точки). Точките по показатели А, В, Г, Д и Е отговарят на минималните национални изисквания, изискванията в правилника за прилагане на ЗРАС в БАН и надхвърлят изискването за минималния брой точки по съответния показател съгласно Правилника за условия и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИОМТ-БАН.

2. *Обща характеристика на научната и научно-приложната дейност на кандидата:* Доц. д-р С. Ангелова участва в конкурса с научни приноси отнасящи се към областта на теоретичната химия. Съгласно представените научни трудове, приносите на доц. д-р С. Ангелова са върху планиране и извършване на теоретични изчисления за изследване на структурата и свойствата на органични съединения и комплекси, както и интерпретация на получените резултати и връзката им с експериментални такива. Общият брой на публикациите ѝ е 113, а независимите цитирания на трудовете ѝ – 589 съгласно базата данни Scopus и h-индекс 13. Ръководител е на един проект финансиран от Фонд „Научни изследвания“. Научно-административните дейности: доц. С. Ангелова е научен секретар на ИОМТ-БАН от 2022г. Била е ментор по програмата "Студентски практики" на МОН.

3. *Основни научни и/или научно-приложни приноси:* Основните научни приноси в публикациите представени вместо хабилитационен труд са свързани с приложение на квантово-химичните изчисления за: изучаване на електронната структура и свойствата на хемосензорни системи на основата на 1,8-нафталимид и родамин, както и на D-A⁺(D) хромофори за нелинейни оптични приложения; изучаване на комплекси от типа домакин-гост на багрила и кукурбит[7]урил. Използвани са методи на DFT и TD-DFT за изследване на геометрията и електронната структура на

производни на 1,8-нафталимид с цел обяснение на влиянието на различните метални йони върху фотофизичните характеристики и експериментално наблюдаваната селективна сензорна способност. RhPzNH_2 е изследван като молекулно логическо устройство и е показано, че действа като дигитален компаратор. Представено е, че с помощта на DFT изчисления може да бъде предсказано взаимодействието на молекулата-домакин с молекулите на багрилата от термодинамична гледна точка. Получени са нови данни полезни при проектиране за супрамолекулни системи на базата на багрила и СВ[7], които са от значение за фотониката. Получени са нови данни за електронната структура и свойства на хинолизиниеви хромофори чрез DFT, HF и MP2 изчисления. На базата на теоретични и експериментални изследвания е предложена стратегия за проектиране на директно свързани D-A градивни блокове за създаване на нови нелинейни оптични материали на органична основа. Научните приноси в публикациите по показател Г могат да се обобщят като представяне на широк набор от DFT функционали за квантово-химичните изчисления при решаване на конкретни проблеми при процеси на изомеризация, тавтомеризация, агрегация, оптимизиране на геометрията на една или повече молекули и др.

Анализът на представените документи показва, че научните приноси на доц. д-р С. Ангелова са лично дело на кандидата. Представените научни приноси могат да бъдат определени като обогатяване на съществуващи знания и теории.

4. *Критични бележки и препоръки по представените трудове.* Нямам критични бележки.

5. *Заключение:* Направеният преглед на научните и научно-приложните приноси и наукометрични показатели на кандидата в конкурса показва, че са изпълнени всички изисквания - национални минимални изисквания съгласно ЗРАСРБ, Правилника за прилагането му, минимални изисквания съгласно Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в Българска академия на науките и отговарят на изискванията на Правилника за условия и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИОМТ-БАН. **Това ми дава основание с дълбока убеденост да препоръчам на научното жури да вземе положително становище относно заемане на академичната длъжност „професор“ по професионално 4.2. „Химически науки“, научна специалност „Физикохимия“ на доц. д-р Силвия Емилова Ангелова.**

Дата 13.07.2025г.

Изготвил:

/доц. д-р Татяна Куцарова/