

## СТАНОВИЩЕ

от д-р **Бистра Атанасова Стамболийска**, доцент в  
**Институт по органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ) – БАН**  
на материалите, представени за участие в конкурс  
за заемане на академичната длъжност „доцент” в **ИОХЦФ – БАН**  
по област на висше образование 4. „Природни науки, математика и информатика”  
професионално направление 4.2. „Химически науки”,  
научна специалност „Теоретична химия“

В конкурса за „доцент”, обявен в Държавен вестник, брой 79 от 08.10.2019 г. и в интернет-страница на ИОХЦФ – БАН, като единствен кандидат участва д-р Надежда Маркова.

### Общо представяне на процедурата и кандидата

Представеният от д-р Надежда Маркова комплект документи и материали отговарят на изискванията на Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИОХЦФ – БАН. Научните трудове за участие в конкурса са разделени в две групи. В първата група „Публикации в специализирани научни издания, равностойни на монографичен труд“ са включени 5 публикации, 4 от които са публикувани в списания с ранг Q1 и една – в списание с ранг Q2. Тези публикации събират общо 120 точки, при изисквани минимални 100 точки по този показател в Правилника на ИОХЦФ-БАН. В документите по конкурса съгласно изискванията е представен и хабилизационен труд, който се базира на тези 5 публикации. Във втората група „Други оригинални научноизследователски публикации” извън хабилизационния труд са включени 13 публикации, от които 1 - в списание с ранг Q1, 5 – в списания с ранг Q2, 4– в списания с ранг Q3 и 3 - в списание с ранг Q4, които събират 201 точки при изисквани минимални 200 точки. Приложен е списък със 100 цитирания в реномирани списания, реферирани в световните бази данни Web of Science и Scopus. Събраните точки по този показател са 200 при минимално изискуеми 70. Горната справка показва, че по всички наукометрични показатели д-р Н. Маркова надхвърля националните и допълнителните минимални изисквания на ИОХЦФ – БАН за присъждане на академичната длъжността „доцент“.

Д-р Надежда Маркова е завършила висшето си образование по химия в ШУ “Константин реславски“ през 2000 г. От 2002 до 2005 е редовен докторант в ИОХЦФ под ръководството на проф. В. Енчев. След успешна защита на дисертация на тема „Теоретични изследвания на тавтомерни равновесия в органични молекули с отчитане на специфичното влияние на разтворителя“ през 2006 г. и е присъдена образователната и научна степен „доктор“ по теоретична химия. От 2006 до момента е главен асистент в ИОХЦФ.

### Обща характеристика на дейността на кандидата

Научните изследвания на кандидатката са отразени в 34 научни публикации, от които 27 са публикувани в специализирани списания с импакт фактор. Цитирани са 314 пъти в литературата, което е показателно за нивото и за актуалността на проведените научните изследвания. Индекс на Хирш по Scopus е 7. Личното участие на д-р Надежда Маркова в проведените изследвания за мен е безспорен. Те е първи автор в 11, а автор за кореспонденция в 4 от участващите в конкурса публикации.

Резултатите от научните изследвания са докладвани на международни и национални конференции с 39 постерни и 17 устни доклади.

За участие в конкурса са представени 18 статии, публикувани в реномираните научни списания, сред които следва да се отбележат *J. Phys Chem., Int. J. Quant. Chem. J. Mol. Stuct., Phys. Chem Lett., Acta Biomater., Struct. Chem., Comput. Theor. Chem.*

В представения хабилитационния труд на тема „Водата като среда и катализатор при тавтомерни реакции“ са обобщени изследванията върху механизма на реакции с подпомогнат от водни молкули пренос на протон в биологично интересни молекули – нуклеобаз, нуклеозиди и техни аналози. Съществен принос е създаването на теоретичен модел за изследване на тавтомерни равновесия в течности на базата на молекулно-динамичен и квантово-химичен подход. С този модел успешно са изследвани тавтомерни равновесия при азаурацили, нуклеозидите инозин и гуанозин, и ацикличния аналог на гуанозина – ацикловир във воден разтвор. Скоростните константи на реакциите на тавтомеризация са достатъчно големи за да се генерират т.нар. „редки“ тавтомерни форми. Реакциите се извършват в един етап, по асинхронен съгласуван механизъм. На базата на квантовохимични пресмятания, теоретични и експериментални  $^1\text{H}$ ,  $^{19}\text{F}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР и Раманови спектри е оборено схващането, че във воден разтвор при  $\text{pH} = 7.8-10$  съществуват и двата възможни азаниона (N1 и N3) на 5-флуороурацил и е показано, че всъщност съществува равновесие между различни тавтомерни форми само на енергетично по-изгодния анион N3.

Работите извън хабилитационния труд на кандидатката отново са свързани с механизма на органични реакции, както и с изясняване на структурата на органични и координационни съединения. Проведени са изследвания за влиянието на електрично поле и електронното състояние на органични молекули върху механизма на реакциите с вътрешно молекулен пренос на протон. Предложена е моделна тавтомерна система, при която при прилагане на постоянно външно електрично поле се стабилизират различни тавтомерни форми и по този начин това съединение може да бъде използвано при дизайна на молекулни електронни устройства с разнородни приложения. Синтезирано е ново съединение с необичайно силно стоксово отместване за обяснението, на което е предложен механизъм за вътрешномолекулен пренос на протон в първо синглетно възбудено състояние с две последователни реакции на тавтомеризация. Показано е, че наличието на 5-флуороурацил (физиологичен разтвор,  $\text{pH} 10-11$ ) в реакционната среда оказва влияние върху полимеризацията и върху образуването на наночастиците, повлиявайки иницирирането на полимеризационна реакция.

С помощта на подходящи квантовохимични и спектрални методи е изяснена структурата на различни органични съединения: производни на бромирани амиди на цинамоилови аминокиселини, спирохидантоини на нафталимиди, двата изомера на аминоктиазолидин и тавтомерните форми на 2-карбамидо-1,3-индадион. Установено е, че две новосинтезирани съединения: 2-(метилтио)-1,3-диазаспиро [4.4]нон-2-ен-4-он и 2-(метилтио)-1,3-диаза-спиро[4.4]нон-2-ен-4-тион, в различни състояния съществуват под формата на различни тавтомери – един тавтомер в твърда фаза и друг тавтомер в разтвор. Предложено е това явление да бъде наречено десмокататропия.

Научно-изследователската дейност на кандидатката включва и ръководство и участие в редица национални и международни проекти. Като главен асистент д-р Надежда Маркова е била ръководител на проект по ОП „Развитие на човешките ресурси“ за подкрепа на специализирани публикации в реферирани издания, а в момента е ръководител два проекта, финансирани от ФНИ, единият от които е по двустранно сътрудничество с Индия. Тя е член на колективите на 3 проекта по ЕБР с Белгия, 3 проекта към ФНИ, проект между БАН и МАНУ и вътрешен проект на АУ -Пловдив.

Д-р Надежда Маркова има активна учебно-преподавателска дейност. Била е съръководител на една бакалавърска и една магистърска тези на студент от Факултета по химия и фармация, СУ, консултант на един докторант от Югозападен Университет „Неофит Рилски“ – Благоевград и един докторант от Аграрен Университет – Пловдив и ментор на девет специализанти в рамките на проект „Студентски практики – Фаза I“ на МОН.

### **Лични впечатления**

Познавам д-р Надежда Маркова като задълбочен изследовател, който с успех прилага квантово-химичните методи за решаване на различни проблеми, свързани с изясняване на механизмите на органични реакции и изследване на процесите в биологични системи. Тя с голямо желание и старание се включва в обучението на студенти и млади учени. Впечатлена съм от уменията ѝ да търси и намира партньори в решаването на различни научни проблеми, както и да организира и ръководи интердисциплинарни колективи, в качеството си на ръководител на проекти.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

В обявения конкурс д-р Надежда Маркова представя достатъчен брой научни трудове с високо качество, публикувани след материалите, използвани при защитата на ОНС „доктор”. Големият брой цитирания са еднозначно доказателство за актуалността на проведените изследвания и използването им от научната общественост. Научната квалификация на д-р Надежда Маркова в областта на теоретичната химия е несъмнена. Постигнатите от нея резултати в научно-изследователската дейност значително надхвърлят изискванията на Института по органична химия с център по фитохимия при БАН за приложение на ЗРАСРБ.

След запознаване с представените в конкурса материали и научни трудове, анализ на тяхната значимост и съдържащи се в тях научни приноси, намирам за основателно да дам своята положителна оценка и да препоръчам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ – БАН за избор на д-р Надежда Маркова на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Теоретична химия.

12.02.2020 г.

Изготвил становището:

/доц. д-р Б. Стамболийска/