

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Ирена Любомирова Филипова,
Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия – БАН

Член на научно жури в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2 Химически науки, научна специалност: „Органична химия“ за нуждите на лаборатория „Органичен синтез и стереохимия“

1. Общо представяне на получените материали по процедурата

Със заповед № РД-09-54/28.03.2024 год. на Директора на ИОХЦФ – БАН съм утвърдена за член на научното жури във връзка с процедура по обявен конкурс за академичната длъжност „доцент“ за нуждите на лаборатория „Органичен синтез и стереохимия“, обявен в Държавен вестник, брой 9 от 30.01.2024 г. В конкурса като единствен кандидат участва гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева. Представеният от кандидата комплект материали е в съответствие с Правилника за развитие на академичния състав на ИОХЦФ и отговаря на критериите на ИОХЦФ-БАН за заемане на академичната длъжност „доцент“.

За участието си в конкурса за „доцент“ д-р Вера Денева е приложила 16 научни труда извън дисертацията си за „доктор“, които са по проблематиката на конкурса и се приемат за рецензиране:

- Публикации равностойни на хабилитационен труд (Показател В) – **6 броя**, разпределени по съответните Q фактори, както следва: **Q1 - 5 бр., Q2 - 1 бр.**
- Публикации, извън равностойните на хабилитационен труд (Показател Г) – **10 броя**, разпределени по съответните Q фактори, както следва: **Q1 – 7 бр., Q2 - 3 бр.**

По показател Д са представени 118 цитирания на научните трудове на кандидата. По показател Ж, проверка в базата данни на Scopus показва, че след изключване на автоцитиранията, д-р Денева притежава *h* фактор 10, с което покрива изискванията на ИОХЦФ за академичната длъжност „доцент“. Резултатите от изследванията са представени на 13 национални и международни научни форуми като постерни съобщения и устни доклади. Д-р Денева е представила участия в 12 научноизследователски проекта, като кандидатът е ръководител на един проект за млади учени, финансиран от ФНИ.

Представените статии като брой, импакт фактор и цитируемост, отговарят на изискванията, поставени от ИОХЦФ–БАН за заемане на длъжността „доцент“. Минималните изисквани точки по групи показатели за заемане на академичната длъжност „доцент“ са следните: по показател В точките са 145 и надхвърлят изискуемият минимум от 100 точки, по група показатели Г точките са 235 и също надхвърлят минимума от 220, по група показатели Д точките са 236 като значително надхвърлят минимума от 70.

2. Обща характеристика на дейността на кандидата

Научните интереси на кандидата са насочени основно към изучаването на тавтомерните свойства на разнообразни органични съединения в УВ-ВИС областта, способността им за комплексообразуване и потенциалните им приложения като молекулни превключватели. Приносите от изследователската дейност на гл. ас. Вера Денева са обобщени в три основни направления – (1) тавтомерия на азобагрила, (2) тавтомерия на Шифови бази и (3) други тавтомерни системи.

Първото направление включва изследване на тавтомерното поведение на арил-азо производни на нафтоли за контрол на протонния пренос. Проучена е тавтомерията като основен превключващ механизъм при селективното комплексообразуване с лиганда 4-(фенилдиазенил) нафтален-1-ол като тавтомерен фрагмент и амидна група като антена за свързване с метални йони. Разработена е система, при която комплексообразуването с метални йони отмества напълно тавтомерното равновесие към кето тавтомера. В рамките на същото направление е изследван механизмът на превключване на етил-2-(2-(хинолин-8-ил)хидразоно)-2-(пиридин-2-ил)ацетат, чрез комбинация от експериментални и теоретични методи. Резултатите показват, че най-вероятният механизъм за процеса на превключване е пренос на протон. Анализирани са два нови ротационни превключвателя на базата на 4-хидроксикумарин, съдържащи фиксирани карбонилни групи в ротора. Установено е, че структурата на статора и полярността на разтворителите не оказват влияние върху азохидразоновата тавтомерия и двете съединения съществуват като кето тавтомери.

Приносите във второто направление на научноизследователската работа на кандидата могат да се обобщят, както следва:

1. Охарактеризирани са две 5-заместени фталимидни Шифови бази, съдържащи салицилов или хидроксинафтилов остатък. Установено е, че при съединението с нафтилова част се наблюдава тавтомерно равновесие, зависещо от разтворителя, докато при съединението с фенилова част тавтомерия липсва. И при двете съединения е регистриран вътрешномолекулен пренос на протон във възбудено състояние до кето тавтомери и емисии с големи Стоксови отмествания в различни разтворители.

2. Изследванията на тавтомерното равновесие при 7-хидрокси хинолинови Шифови бази показват, че 8-((фенилимино)метил)хинолин-7-ол съществува като смес от тавтомери, докато пентафлуорофенилният му аналог съществува единствено в енолната си форма. При облъчване, и при двете съединения се наблюдава въртене около връзката $C_{quin}-CH$ чрез вътрешномолекулен пренос на протон във възбудено състояние, което ги прави подходящи кандидати за използване като превключватели.

3. Показано е, че предпочитаният начин на превключване при *N*-(бензо[d]тиазол-2-ил)пиколинамид и *N*-(бензо[d]тиазол-2-ил)изоникотинамид е пренос на протон във възбудено състояние от амидния към бензотиазоловия азот и при двете изследвани съединения.

В третото направление отново са представени изследвания върху тавтомерното поведение и механизма на пренос на протон в различни тавтомерни системи. При 10-хидроксибензо[h]хинолин и неговите нитро производни е проучено влиянието на електронноакцепторните заместители. Доказано е, че добавянето на нитро заместители

води до появата на съответните кето тавтомери в основно състояние и до промени във възбуденото състояние. Изследвано е тавтомерното поведение и асоциацията в разтвор и в твърдо състояние на два лиганда от пиненов тип. Изяснено е динамичното равновесие между различните структурни форми на фавипиравир в разтвор с помощта на молекулярна спектроскопия и квантово-химични изчисления, което повлиява биологичната му активност и ефективност.

Работите извън хабилитационния труд на кандидата са свързани с използването на близката инфрачервена спектроскопия за бързо количествено и недеструктивно определяне на активните компоненти в *Arnicae flos*, вещество, получено от растенията *Arnica montana* L. и *Arnica chamissonis* Less. Рамановата спектроскопия е използвана като бърза, недеструктивна аналитична техника за класифициране на български вина и оценка на техния химичен състав.

3. Критични забележки и препоръки

Бих искала да отбележа, че разширената хабилитационна справка би била по-добре организирана, ако номерацията на цитираните в нея публикации съответства на номерацията въведена в показателите **В** и **Г**. За по-добра визуализация файловете с публикации по показатели **В** и **Г** могат да бъдат представени библиографски, а именно с име на списанието (*Standard Journal Abbreviation*), година на издаване, том и номер на страница.

Имам няколко забележки относно наименования на съединенията:

- Съгласно номенклатурата на IUPAC, заместителите при фталимидните Шифови бази са на 5-та позиция, а не на 4-та, както е указано.
- Не е коректно 4-хидроксикумарин да бъде наименуван „4-ОН кумарин“.

Схема 2 в хабилитационната справка не илюстрира написаното, липсва структурата с амидна група: „Публикация 2 проследява тавтомерията като основен превключващ механизъм при селективното комплексообразуване с лиганда 4-(фенилдиазенил) нафтаден-1-ол като тавтомерен фрагмент и амидна група като антена за свързване с метални йони (Схема 2).“

Забелязват се разминавания между хабилитационната справка и цитираните в нея публикации. Например: „Доказано е, че добавянето на електронноакцепторни заместители в позиция 7 в скелета на *HBQ*, води до появата на кето тавтомер в основно състояние и до промени във възбуденото състояние“. Докладваните съединения са три, като две от тях са с нитро заместител: в позиция 7 (7-нитробензо[h]хинолин-10-ол) и в позиция 7,9 (7,9-динитробензо[h]хинолин-10-ол), както е указано и в схема 4 от хабилитационната справка, което не става ясно от текста в нея.

Очертаните перспективи за научни изследвания през следващите 3 години в хабилитационната справка са представени много общо. Може би е удачно да се конкретизират поне класовете органични съединения, които ще се изследват.

Забелязаните грешки и неточности не повлияват като цяло на доброто ми впечатление от представените документи и материали по конкурса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Документите и материалите, представени от гл. ас. д-р Вера Денева отговарят на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, Правилника на БАН и Правилника на ИОХЦФ-БАН.

Въз основа на представените в конкурса материали и отразените в тях научни и научно-приложни приноси, давам своята положителна оценка и препоръчвам на останалите членове на Научното жури да бъде изготвен доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ за присъждането на академичната длъжност „доцент“ на главен асистент д-р Вера Венциславова Денева по професионално направление 4.2. „Химически науки“, научна специалност „Органична химия“ за нуждите на лаборатория „Органичен синтез и стереохимия“.

21.05.2024 г.

Изготвил становището:

доц. д-р Ирена Филипова