

# СТАНОВИЩЕ

от д-р Росица Димитрова Николова, професор в Факултет по химия и фармация на Софийски университет „Св. Климент Охридски, на материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност ‘доцент’ в Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика професионално направление 4.2 Химически науки, научна специалност „Органична химия“

В конкурса за ‘доцент’, обявен в Държавен вестник, бр.9 от 30.01.2024 год., и в интернет-страница на ИОХЦФ, БАН, като единствен кандидат участва гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева от Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН.

Представеният от д-р Вера Денева комплект материали на хартиен носител 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“. Кандидатът д-р Вера Денева е приложил общо 26 научни труда. Приемат се за рецензиране 16 научни труда, които са извън дисертацията и се отчитат при крайната оценка и 13 научноизследователски проекти. Не се рецензират 5 научни труда по дисертацията и 5 научни труда извън проблематиката на конкурса. Разпределението на научните трудове по съответните Q фактори е както следва: 12 (75%) публикации в Q1 и 4 (25%) в Q2.

## 1. Кратки биографични данни на кандидата

Гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева е завършила през 2007 год. бакалавърска, а през 2009 г. магистърска степен в Химическия факултет на Софийския университет „Св. Климент Охридски“. От 2009 г. е редовен докторант в ИОХЦФ- БАН с научен ръководител проф. дхн Людмил Антонов. Докторската ѝ дисертация на тема “Експериментални и теоретични изследвания на тавтомерни системи на основата на аза-нафтоли и техни азометинови аналози” е защитена успешно през 2013 г. През 2012 год. след конкурсен изпит е назначена като асистент, през 2017 год. е повишена в главен асистент в ИОХЦФ-БАН, където работи до момента.

В периода от 01.10.2011 до 15.06.2012 г. е била на специализация в Швейцария. Д-р Денева е носител на наградата на БАН „И.Е. Гешов“ за млад учен през 2012 г.

## 2. Обща характеристика на дейността на кандидата

Представената документация гл. ас. д-р Вера Денева е подготвена съгласно всички изисквания и препоръки.

**По показател А1.**

50 точки

Кандидатът Вера Денева е защитил дисертационния си труд на тема “Експериментални и теоретични изследвания на тавтомерни системи на основата на аза-нафтоли и техни азометинови аналози” през 2013 г. под ръководството на проф. дхн Людмил Антонов.

**По показател В4.**

145 точки

Представени са шест научни публикации по тематиката на конкурса, отпечатани в специализирани международни списания, реферирани в SCOPUS и ISI Web of Science с импакт фактор, от които 5 в Q1 и една в Q2. Средният IF на публикациите е 4.36. По този показател кандидатът надвишава минималните изисквания от 100 точки.

**По показател Г7.**

235 точки

Кандидатът гл. ас. д-р Вера Денева е представила като съавтор 10 научни публикации с импакт фактор и са реферирани в Scopus и ISI Web of Science - 7 от Q1 (70%) и 3 от Q2 (30%). От представените публикации 8 са с  $IF > 3$ , а общият IF на публикациите е 34.40. За 5 от публикациите д-р Денева е първи автор, а за 4 автор за кореспонденция.

По този показател кандидатът надвишава минималните изисквания от 200 точки.

Резултатите от изследванията са представени на 13 национални и международни форума като 11 постерни съобщения и 2 устни доклада.

**По показател Д11.**

236 точки

При подготовката на становището са забелязани 391 цитата в Web of Science и Scopus. Минималните изисквания по този показател са 50 точки, кандидатът е представил за конкурса 118 цитата, с което многократно надхвърля изискванията.

**По показател Е.**

174 точки

До подаване на документите, според международните бази данни - Web of Science с h-индекс 11 и Scopus с h-индекс 10, кандидатът отговаря на минималните изисквания за заемане на длъжност Доцент.

Д-р Денева развива активна проектна дейност. Представени са участия в 10 научни проекта с ФНИ, на 1 от които кандидата е ръководител и участие в 3 международни проекта.

Анализът на представените документи показва, че д-р Денева не само изпълнява, но и надхвърля минималните изисквания по конкурса.

**3. Оценка на научните резултати**

Представените научни съобщения на кандидата, са в научната област, по която е обявен конкурсът. Научните изследвания на гл. ас. д-р Вера Денева са в областта на молекуланата спектроскопия и са свързани главно с изследване на тавтомерното равновесие на органични съединения, комплексобразователната им способност и потенциалните им приложения:

- Азобагрила.

Изследвано е тавтомерното поведение в различни разтворители на арил-азо производни на нафтоли със структурни модификации за контрол на протонния пренос. С помощта на

спектроскопски методи и квантово-химични изчисления е установено, че структурните модификации влияят върху тавтомерията, а образуването на комплекси с алкалоземни метали води до значителни спектрални отмествания.

Изучено е тавтомерното равновесие при 4-(фенилдиазенил)нафтален-1ол и е разработена система, при която комплексобразуване с метални йони отнема изцяло равновесието към кетотавтомера. На тази основа е разработен е теоретичен дизайн на тавтомерни оптични сензори за откриване на метални йони.

Изследвани са гранични случаи на азо и хидразо тавтомери на две серии азобагрила, съдържащи пиразолов пръстен, с помощта на спектрални и квантово-химични методи.

С комбинация от експериментални и теоретични модели е изследван механизма на превключване на етил-2-(2-(хинолин-8-ил)хидрзоно)-2-9пиридин-2-ил)ацетат. Анализирани са и два нови ротационни превключвателя на базата на 4-хидроксикумарин. Установено е, че структурата на статора и полярността на разтворителя не оказват влияние върху азохидразоновата тавтомерия, но влияе върху емисионното им поведение.

- Шифови бази

Изследвано е тавтомерното равновесие при две 4-заместени фталимидни 2-хидроксилни Шифови бази с различни 2-хидроксиарилови фрагмента и е установено, че при съединението съдържащо хидроксиафтилен фрагмент се наблюдава тавтомерно равновесие, зависещо от разтворителя, а при съединението с хидроксифенилен фрагмент - не.

Резултатите от изследванията на две новосинтезирани Шифови бази, получени от 7-хидроксихинолин, че при облъчване проявяват въртене около специфична връзка чрез вътрешномолекулен пренос на протон във възбудено състояние, което ги определя като подходящи кандидати за използване като двустабилни превключватели.

Изучена е тавтомерията при бензотиазопиколин и изоникотинамидни Шифови бази в основно състояние и преноса на протон във възбудено състояние и е установено, че двете съединения имат еднакво фотодинамично поведение и са с потенциал за приложение като оптоелектронни устройства.

- Хетероциклични тавтомерни системи.

Изучен е механизма на пренос на протон в 10-хидроксибензо[h]хинолин и негови производни и е установено, че наличието на електронакцепторен заместител в позиция 7 води до появата на кето тавтомер в основно състояние и до промени във възбудено състояние.

С помощта на спектрални методи и квантово-химични изчисления е изследвано тавтомерното поведение фавипиравир в разтвор. Изучени е динамичното равновесие между различните структурни форми на съединението и влиянието им върху биологичната му активност и ефективност.

Изследвано е фотохимичното поведение и на съединения, съдържащи пиридинов пръстен, пиненови фрагменти и 1,3,5-триазини и възможностите за тяхното приложение.

- Други изследвания.

Изследвана е възможността за използване на близка инфрачервена спектроскопия (НИР) за разработване на бърз неструктивен метод за анализ на фармакологично значимите компоненти в *Arnica flos* – фенолни киселини, флаваноиди и сескитерпенови лактони.

Предложен е и бърз неструктивен метод за изследване и класифициране български вина по район и сорт с помощта на Раманова спектроскопия. Изследвани са фенолни компоненти в бели и червени вина

Представените научни публикации са свързани с решаване на значими за науката и практиката проблеми; а получените резултати показват възможности за потенциалното приложение на изследваните вещества като молекулни превключватели. При изследванията са използвани широк спектър от спектрални и теоретични методи. Тематиката е актуална и значима.

#### **4. Оценка на личния принос на кандидата**

За мен е безспорен личния принос на кандидата в настоящите изследвания. В 6 представените публикации д-р Денева е първи автор от публикациите, а за 4 автор за кореспонденция.

#### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Документите и материалите, представени от гл.ас. д-р Вера Денева отговарят на всички изисквания(та) на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, Правилника за прилагане на ЗРАСРБ на БАН и Правилник на ИОХЦФ-БАН. Постигнатите от *д-р Вера Денева* резултати в научно-изследователската дейност, напълно съответстват на специфичните изисквания на Правилник на ИОХЦФ-БАН за приложение на ЗРАСРБ.

Кандидатът в конкурса е представил достатъчен брой научни трудове, публикувани след материалите, използвани при защитата на ОНС ‘доктор’. В работите на кандидата има оригинални научни и приложни приноси, които са получили международно признание и отзвук, като всички са публикувани в списания, издадени от международни академични издателства. Теоретичните му разработки имат потенциал за практическа приложимост. Научната квалификация на д-р Вера Денева е несъмнена.

След запознаване с представените в конкурса материали и научни трудове, анализ на тяхната значимост и съдържащи се в тях научни и научно-приложни резултати, 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 гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева на академичната длъжност ‘доцент’ в ИОХЦФ-БАН по професионално направление **4.2 Химически науки**, научна специалност **„Органична химия“**.

22.05.2024 г.

**Изготвил становището:** .....

(проф. д-р Росица Николова)