

СТАНОВИЩЕ

от доктор Явор Николаев Митрев, доцент в Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия към Българска Академия на Науките
на материалите, представени за участие в конкурс
за заемане на академичната длъжност „доцент“

в Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН
по област на висше образование 4.2 Химически науки, професионално направление
"Органична химия" за нуждите на лаборатория: "Органичен синтез и стереохимия"

В конкурса за доцент, обявен в Държавен вестник, бр. 9 от 30.01.2024 г. 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.

1. Общо представяне на процедурата и кандидата

За участие в обявения конкурс са постъпили документи от единствен кандидат гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева от Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН. Представеният от д-р Денева 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“.

Кандидатът е приложил списък с общо 26 научни статии, като за участие в конкурса са избрани 16 от тях, които са извън дисертацията и се отчитат при крайната оценка. Посочените публикации са по тематиката на конкурса и се приемат за рецензиране, като 6 от тях са представени като еквивалентен брой статии за хабилизационен труд (критерий В) и 10 като участващи в конкурса по критерий Г. Разпределението на научните трудове по квартали е: Q1: 12 бр. и Q2 4 бр., като следва да се отбележи, че две от списанията (*Spectrochimica Acta Part A* и *Foods*), са разпределени в квартал 2 според Scopus и кандидата, но попадат в първи квартал съгласно определението на Web of Science, и би трябвало да се отчетат като такива. Дори и с посочената неточност, приложените статии надхвърлят минималните изисквания на ИОХЦФ както следва: по критерий В – 145 т. (при необходими 100 т.) и по критерий Г – 235 т. (при необходими 220 т.) По критерий Д са представени 118 цитата, значително надвишавайки изискуемия минимум (35 бр.), като прави добро впечатление, че посочените цитати са единствено върху статиите, представени за участие в конкурса. По критерий Ж, след направена справка в Scopus е установен *h*-индекс 10 след изключване на авотцитиранията за всички автори, надхвърляйки двукратно изискванията на ИОХЦФ за академичната длъжност доцент. По конкурса са представени и редица допълнителни материали – списък с участие в 13 научноизследователски проекта, на един от които кандидата е ръководител, данни за участия в конференции, специализация в чужбина и грамота за присъдена награда Иван Евстратиев Гешов за най-млади учени.

Д-р Денева получава магистърска степен по Органична химия от Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, Химически факултет (сега Факултет по Химия и Фармация) през 2009 г. и същата година започва докторантура в Института по Органична Химия с Център по Фитохимия. След защита на дисертационен труд през 2012 г. последователно заема академичните длъжности асистент в периода 2012-2017 г. и главен

асистент от 2017 г. до момента, поставяйки отлични основи за участието и в настоящия конкурс.

2. Обща характеристика на дейността на кандидата

Съгласно представените материали, научните интереси на кандидата са в областта на приложението на спектроскопия във видимата и ултравиолетовата област за изучаване на тавтомерните свойства на разнообразни органични съединения. Изследванията са обобщени в три направления, обединени около класовете изследвани съединения – тавтомерни системи на база азобагрила (публикации **1-6, показател В**), системи на основата на Шифови бази (публикации **1-3, показател Г**) и други тавтомерни системи (публикации **4-8, показател Г**), като са представени и 2 статии с други тематични изследвания.

Като научни приноси в отделните направления могат да се отбележат:

Изследвания върху върху тавтомерни системи на основата на азобагрила

- Изследвани са тавтомерните равновесия в няколко системи на основата на 4-(фенилдиазенил) нафтален-1-ол, като е направена оценка на възможността за контрол на равновесието посредством протониране и комплексообразуване с алкалоземни метали. В следваща публикация, на база съществуващи структури и теоретични пресмятания е предложен дизайн на нов сензор за откриване на алакалоземни метални използвайки същата платформа и пинсетоподобни йонофори, съдържащи amidна група като заместители, които подпомагат комплексообразуването.

- Направена е оценка на тавтомерните равновесия в разтвор и твърдо състояние на две серии азобагрила включващи пиразолов пръстен, като е установено, че варирането на заместителя на позиция 5 позволява отместване на тавтомерното равновесие изцяло към аза- или хидразо- формите.

- С помощта на молекулна спектроскопия (УВ-ВИС и ЯМР) е изследвано поведението на три ротационни превключвателя - етил-2-(2-(хинолин-8-ил)хидразоно)-2-(пиридин-2-ил) ацетат и две производни на 4-хидрокси кумарин. На база на експерименталните резултати и квантово химични изчисления е предложен механизъм превключването за всяко от изследваните съединения.

Изследвания върху върху тавтомерни системи на основата на азометинова връзка:

- Изследвано е тавтомерното равновесие на шифови получени от фталимид и салицилов и 2-хидрокси нафтилови остатъци. Установена е зависимост между размера на хидроксиароматния заместителя и използвания разтворител върху тавтомерните свойства на такъв тип системи.

- Разгледани са два примера на шифови бази, получени от 7-хидрокси хинолин, като е установено, че едно от съединенията е обещаващ кандидат за двустабилни превключватели, задействащи се при облъчване с дължина на вълната 365 nm.

- Посредством спектрални и квантово-химични методи е изяснена фотофизиката и динамиката на протонния пренос при N-(бензо[d]тиазол-2-ил)пиколинамид и N-(бензо[d]тиазол-2-ил)изоникотинамид, като е установено, че предпочитаният механизъм е пренос на протон във възбудено състояние от amidния към бензотиазоловия азот.

Други тавтомерни системи:

Публикациите, обобщени в третото направление обхващат изследвания на тавтомерните и конформационни равновесия в разтвор, а някои случаи и в твърдо състояние при разнообразни органични съединения – производни на на 10-хидроксibenзо[h]хинолин, роторен превключвател на основата на заместен хинолин, производни на пинен-бипиридина и пинен-фенантролина, противовирусния препарат фавипиравир, както и серия от съединения с потенциални OLED свойства.

Последните две публикации отразяват използването на спектрални техники за определяне на активни компоненти в природни продукти и определяне на качеството на български вина.

Предвид, че в по-голяма част от разгледаните материали основната цел е характеризиране на тавтомерни равновесия на избрани съединения, изследване на факторите, които го повлияват и възможностите за неговото контролирано насочване смятам, че научните приноси могат да се отнесе към категорията „доказване с нови средства на съществени нови страни на вече съществуващи научни области, проблеми, теории, хипотези“. Положителен атестат за актуалността на изследванията и тяхното качество е нивото на списанията, в които са публикувани резултатите - 14 от списания попадат в първи квартал и само две от публикациите са в списания с категория Q2. Оригиналността на изследванията е добре приета от научната общност, за което свидетелства броя цитирания – 118 независими цитата от публикации в международни специализирани списания. За съжаление, хабилитационната справка не очертава достатъчно ясно личните приноси на кандидата, но факта, че д-р Денева е първи автор в 6 от статиите и втори – в 5, ми позволява да приема, че кандидата има съществено участие в разгледаните изследвания.

3. Критични забележки и препоръки

Основните ми забележки към кандидата са свързани с оформлението на хабилитационната справка и структурирането на представения материал. Лично аз очаквах по-подробно изложение, особено в частта с публикациите по критерий В, които по мое виждане би следвало да отразяват в по-голяма степен научните приноси на кандидата, особено предвид интердисциплинарния характер на рецензираните статии. Отчитам като затруднение при анализа на материалите и разминаването в подредбата на литературата в хабилитационната справка, списъците с публикации по отделните критерии и приложените пълнотекстови копия. В заключение, бих помолил кандидата да даде примери за обектите с които работи към момента и/или планира да изследва в непосредствено бъдеще, тъй като намирам очертаните перспективи за бъдещи изследвания за сравнително общо дефинирани.

Описаните по-горе препоръки не омаловажават научната стойност на разгледаните материали и смятам, че по-скоро биха помогнали на кандидата при следващи обобщения и представяне на научни резултати.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Кандидатът в конкурса е представил достатъчен брой научни трудове, публикувани след материалите, използвани при защитата на ОНС „доктор“, като постигнатите

резултати в научно-изследователската дейност, съответстват и в някои случаи надхвърлят специфичните изисквания на Правилник на ИОХЦФ-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, давам своята положителна оценка и препоръчвам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ-БАН за избор на главен асистент Вера Денева на академичната длъжност доцент в ИОХЦФ-БАН по професионално направление 4.2. „Химически науки”, научна специалност „Органична химия” за нуждите на лаборатория “Органичен синтез и стереохимия”.

22.05. 2024 г.

Изготвил становището:
(доц. Д-р Явор Митрев)