

РЕЦЕНЗИЯ

**по конкурса за професор по професионално направление 4.2. Химични науки
(Теоретична химия), обявен в ДВ бр. 51 от 27. 06. 2017 г.**

Рецензент: проф. д-р Цветанка Иванова

Единственият кандидат по конкурса за заемане на академичната длъжност „Професор“ по научна специалност 4.2. Химически науки (Теоретична химия), обявен за нуждите на катедрата по физикохимия на СУ „Св. Климент Охридски“ е доц. Анела Николова Иванова. Представената документация от кандидатката отговаря на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за приложението му и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“, както и на наукометричните показатели и критерии на ФХФ.

Доц. Анела Иванова завършва през 1999 г. с отличен успех висшето си образование в Химически факултет със специализация „Химическа физика и теоретична химия“, като през 1996 г. печели стипендия на Фондация „Еврика“, а през 1999 г. и наградата на Фондация „Св. Кл. Охридски“ за най-добър студент. През 2004 г. защитава дисертация за получаване на образователната и научна степен „доктор“ на тема „Теоретично изследване на организацията, електричните и магнитни свойства на амфифилни молекули на границата вода/въздух“. За периода 2004-2017 след обявени конкурси заема последователно академичните длъжности от ст. асистент до доцент по теоретична химия в катедрата по физикохимия на Факултета по химия и фармация, където работи без прекъсване до момента. През 2009 г. печели наградата на Софийска община за най-добър млад учен на СУ „Св. Кл. Охридски“. В периода 2013-2015 доц. Иванова е заемала длъжността на зам. Декан по учебните въпроси (ОКС „Магистър“). Била е на специализации в престижни институти и университети (стипендия Marie Curie в Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz (Germany), Institute for Chemistry of Surfaces and Interfaces, Mulhouse (France), стипендия Alexander von Humboldt в Technical University, Munich (Germany) и др. В момента доц.

Иванова е приемащ учен на пост-докторант от Германия - Dr. Kai S. Exner, Feodor Lynen стипендиант на Фондация „Alexander von Humboldt“ за период от 2 години (2017-2019).

Основните резултати от изследователската дейност на доц. Иванова са в една актуална и модерна област на науката с важно фундаментално значение - теоретичната химия. Тази област на познанието в последните десетилетия е процес на интензивно развитие. Изследвания с помощта на различни теоретични подходи, като напр. построяването на молекулни модели, съпоставени повече или по-малко с експериментални данни биха имали и потенциално приложно значение. Такъв вид изследвания са важна и необходима стъпка за разбирането на сложните биологични процеси, за развитието на нови технологии във фармацията и медицината, даващи възможности за превенция на заболявания, диагностика и лечение. - теми, към които доц. Иванова в последните години е насочила своето внимание.

Научните ѝ изследвания могат да бъдат групирани в две направления: 1) Изучаване на биоструктури, включващи организацията на амфифилни молекули на междуфазови граници и самоорганизацията им в обема и 2) Моделиране на молекулни компоненти за наноматериали.

В хабилитационния ѝ труд първата тема е представена с 15 публикации (№№ 1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 16, 17, 19 и 20). Ще се спра на някои от приносите на доц. Иванова, отнасящи се до структурната организация и самоорганизация на амфифилните молекули, имащи пряко значение за редица биологични процеси или представляват приложен интерес. Важно значение имат изследванията ѝ върху липидите, които заедно с протеините са основни структурни елементи на цитоплазмените, митохондриалните, ядрените и др. природни мембрани, имащи разнообразни функции. Съвременните представи за архитектурата и поведението на природните мембрани се основават в голяма степен на изследване на състоянието и свойствата на експериментални моделни системи и молекулни симулации. В работите (публикации №№ 19, 20) усилията са съсредоточени върху изучаване на структурата и свойствата на липидни монослоеве от дипалмитоилфосфатидилхолин (DPPC), дикапрын (DC). Изборът на изследваните обекти е направен предвид ролята на всеки един от тях. DPPC е основен градивен елемент на биологичните мембрани, а в някои специални мембранни системи, като повърхностния слой на алвеолокапиллярната макроскопична мембрана достига до 75% от цялото липидно

съдържание. DC е подходяща моделна система при изследвания, напр. на ензимната хидролиза под действието на липолитични ензими. С помощта на молекулно-динамични симулации на моделни монослоеве от DPPC, DC на водна повърхност в серия с различни повърхностни концентрации, доц. Иванова описва различията в поведението на монослоеве от DPPC и DC, предлага набор от структурни характеристики и прави оценка на електричните им свойства. За утвърждаване на развитите модели е полезно съпоставянето на тези характеристики с резултати, получени по традиционни методи за изследване на 2D-системи, като повърхностно налягане, повърхностен потенциал, флуоресцентна микроскопия и AFM и др. Изследванията й корелират с експериментални данни на зависимостта на повърхностното налягане и повърхностния потенциал от площта на молекулите за монослоеве от изследваните системи, като трябва да се отбележи, че интерпретацията на резултатите на електричните свойства е подкрепена и с числени оценки, показващи че електричните свойства на DPPC не са свързани само с нормалната компонента на диполния момент, а и тангенциалната компонента има известен принос към организацията на липидния монослой на повърхност вода/въздух. Показано е също, че чувствителна характеристика е и плътността на поляризация, имаща отношение към фазовите преходи и съответно към организацията на повърхността. В последващи изследвания на моделната система - монослой от DPPC (в дисертационния труд на наскоро защитилата докторантка на доц. Иванова) от профилите на плътността се определя параметъра на порядъка, както и стойности за коефициента на латерална дифузия. Би било интересно получените данни да бъдат сравнени с експериментални резултати за параметъра на порядъка, получени с маркер деутерий [Ивков В.Г. и Берестовский Г.Х.) и стойности за коефициента на латерална дифузия, получени по FRAP метода [Lalchev Z., Ishida H., Nakazawa H.].

Направен е анализ и на друг представител на амфифилни молекули - есцин (публикация № 1). Есцинът, представител на сапонините, привлича вниманието с приложното си значение в медицината с противовъзпалителното и съдосвиващото си действие. С помощта на класически атомистични молекулно-динамични симулации на адсорбирани на водна повърхност неутрални и анионни молекули есцин са проведени изследвания за изясняване на нетипичното реологично поведение на адсорбционните слоеве на границата вода-въздух. Изследвана и кинетиката на спонтанната агрегация на

молекулите на повърхността. Направена е оценка на вътрешномолекулната структура на амфифилиите и разположението им спрямо повърхността. Използван е иновативен подход за изследване на взаимодействията на молекулно ниво, който би могъл да се приложи и към други природни амфифили.

Представяват интерес и оригиналните изследвания с umbrella sampling МД симулации на процес на пренос на пентанол, хексанол и хептанол през фазова граница вода/масло, чрез пресмятане на профилите на изменение на свободната енергия (публикация № 3). Като моделни системи са изследвани течните масла пентан, хексан и хептан. Направени са оценки за енергиите на адсорбция от двете обемни фази на повърхността и на енергията на пренос от вода в масло. Получените резултати за свободните енергии показват добро съвпадение със стойности, които могат да бъдат получени от термодинамичен анализ на опитни данни за зависимостта на повърхностното напрежение от концентрацията.

Направените по-горе коментари и бележки подчертават значимостта на получените от доц. Иванова резултати.

Второто направление в изследванията на доц. Иванова „Моделиране на молекулни компоненти за наноматериали“ е представено с 9 публикации (№№ 2, 12, 14, 15, 18, 21, 22, 23, 24). В тази част от изследванията, свързани с материали от значение за новите технологии в бита, вниманието на кандидатката е насочено към дизайна на нови емитери на светлина за приложение в органични светодиоди и оптичните им свойства, магнитни свойства на спин -хибридни комплекси, структура и електронна плътност на потенциални анодни материали за Li-йонни батерии и т.н.

Всички получени резултати са описани в хабилитационния труд на доц. Иванова озаглавен „Молекулно моделиране на биоструктури и свойства на потенциални компоненти за наноматериали“. Самият хабилитационен труд съдържа 105 страници. Написан е съгласно изискванията и по същество представлява кратко изложение на проведените изследвания в представените по конкурса публикации. В него подробно и изчерпателно са описани конкретните научни приноси, с които тя участва в конкурса.

Обобщените наукометрични данни представят доц. Иванова като изследовател на високо професионално ниво. Общият брой на публикациите за целия творчески период е 53, като от тях 24 са за участие в конкурса за професор. От статиите представени за конкурса

19 са в реномирани международни списания с импакт фактор (в “Langmuir”, The Journal of Physical Chemistry A и B, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, Organic Electronics, Chemical Physics, Journal of Molecular Structure (THEOCHEM) и др.), 4 в списания без импакт фактор и 1 в книга (Progress in Theoretical Chemistry and Physics). Общият импакт фактор на публикациите по конкурса е 55,53. Забелязаните цитирания на работите са 295 (H factor: 11). Общият брой на докладите и постерите представени на международни и национални форуми е впечатляващ - 113, от тях за периода след избора ѝ за доцент през 2009 - 76. За научната активност на доц. Иванова дава представа и участието ѝ в научноизследователски проекти (вкл. и международни). На 8 от тях тя е ръководител и в 9 - участник, а на 1 международен е била отговорник на група.

Доц. Иванова има сериозно участие в преподавателската дейност, която напълно е отразена в представената от нея документация. Тя има активно участие в процеса на подготовка на млади кадри. Била е ръководител и съ-ръководител на 6 магистърски и 1 бакалавърска дипломна работа и научен ръководител на 3 докторанти (2 защитили и 1 текущ).

Справката правилно отразява научните приноси на доц. Иванова.

В заключение, доц. Анела Иванова работи в една актуална тематика, в която се е утвърдила като добър специалист, както у нас така и в чужбина. Имам отлични впечатления от компетентността и коректността ѝ. Всичко казано до тук ми позволява убедено да препоръчам на Уважаемото Научно жури да избере доц. д-р Анела Николова Иванова за професор по теоретична химия в професионално направление 4.2. Химически науки и изразявам пълната си подкрепа на кандидатурата ѝ.

Подпис:

(проф. д-р Цветанка Иванова)

София, 10.11.2017