

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурса за “Доцент“ по професионално направление 4.2 Химически науки
(Теоретична химия), обявен в ДВ, бр. 24 от 16.03.2018 г.
с единствен кандидат: **гл. ас. д-р Диана Валентинова Чешмеджиева**

Рецензент: професор д-р Николай Георгиев Василев, Институт по Органична Химия с
Център по Фитохимия, БАН

1. Биографични данни и допустимост

Д-р Диана Чешмеджиева е завършила с отличен успех специалността „Химия“, ХФ – СУ “Св. Климент Охридски” през 2001 г със специализация „Агрохимия“. През 2010 г. е придобила научната и образователна степен „доктор“ по научна специалност 01.05.01 „Теоретична химия“ като е защитила **дисертация** на тема "*Механизъм и реактивоспособност при алкална хидролиза на амиди*" в ХФ на СУ “Св. Климент Охридски” с научени ръководители проф. дхн Борис Гълъбов и проф. дхн Соня Илиева. През 2004 г. кандидатката постъпва на работа в ХФ на СУ “Св. Климент Охридски”, където протича и цялата и досегашна кариера до гл. ас., която академична длъжност заема и в момента.

Д-р Диана Чешмеджиева е била пост-докторант в Института по молекулни науки към CNRS в Марсилия в периода 2011-2012 г.

Документите за участие в конкурса на кандидатката отговарят на изискванията на Правилника на СУ „Св. Климент Охридски“ и на ЗРАСРБ, а нейният научен и образователен профил са в съответствие с изискванията за доцент по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).

2. Наукометрични показатели на кандидата

Гл. ас. Чешмеджиева участва в конкурса за доцент с 22 научни труда (21 отпечатани и 1 под печат) и 1 автореферат на дисертация. От тези 22 научни труда 4 са включени в докторската ѝ дисертация. Всички публикации са по тематиката на конкурса, като всички са отпечатани в специализирани международни списания, реферирани в ISI Web of Knowledge и/или SCOPUS и са с импакт фактор (IF). В реномирани международни списания като *Chem. Eur. J.* (с IF= 5.317), *Phys. Chem. Chem.*

Phys. (с IF= 4.123) и *J. Comp. Chem.* (с IF=3.229) има публикувани по една статия, в *Tetrahedron* (с IF= 3.011) има публикувани две статии, в *J. Phys. Chem. A* (с IF= 2.639), *Spectrochimica Acta Part A* (с IF= 2.536) и *Tetrahedron Lett.* (с IF=2.193) има публикувани по една статия, в *Journal of Molecular Structure* кандидатката има публикувани 4 статии. Прави впечатление факта, че публикациите са отпечатани в разнообразни реномирани списания (общо 15 различни списания) в зависимост от тематичната насоченост на изследваните обекти.

В материалите по конкурса е представен сериозен списък от **149 цитата** на трудовете на гл. ас. д-р Чешмеджиева (Scopus изчислява **h-индекс** = 7 на базата на 20 статии и 146 цитата). Най-цитирани са четири статии: една в *Journal of Physical Chemistry A* от 2004 г. с 39 цитата, една в *Phys. Chem. Chem. Phys.* от 2011 г. с 16 цитата, една в *Chem. Eur. J.* от 2015 г. с 14 цитата и една в *Computational and Theoretical Chemistry* от 2012 г. с 13 цитата.

Гл. ас. д-р Чешмеджиева е представила в документите си и хабилитационен труд на тема „Теория в подкрепа на експеримента. Изследване на механизми и реактивоспособност при избрани органични реакции“. Хабилитационният труд съдържа 46 страници, 9 таблици, 21 фигури и са използвани 83 литературни източника. В него са обобщени собствените научни изследвания по следните три теми:

- Приложение на квантово-химични подходи за изясняване на механизми на реакции на присъединяване по Михаел с различни субстрати и факторите, които определят стереоселективността им.
- Експериментално и теоретично определяне на фотофизичните свойства на заместени арилхидразони на N-хексил-1,8-нафталимиди. Изясняване на връзката между структурата и фотофизичните им свойства и извеждане на теоретичен модел за предсказване на спектралните свойства на този тип съединения.
- Количествено охарактеризиране на реакционна способност на органични съединения при водородно свързване.

Дори по доста критикувания нов Правилник за прилагане на Закона за развитие на академичния състав (ЗРАС) в Република България показателите на гл. ас. д-р Чешмеджиева отговарят или са значително над минималните национални изисквания към научната дейност на кандидатката за заемане на академичната длъжност „Доцент“ (показатели А и В отговарят на националните изисквания, Г е 223 при минимална стойност 200, Д е 745 при минимална стойност 200).

3. Публикации, представени за участие в настоящия конкурс

Д-р Диана Валентинова Чешмеджиева е обобщила в „авторска справка“ научните приноси в представените от нея научни статии като не са разделени формално статиите, които са включени в докторската и дисертация, а са разгледани заедно с по-късните изследвания на механизми на органични реакции.

Научните приноси на гл. ас. д-р Чешмеджиева според приложената „Авторска справка“ могат да се групират в 5 типа приложения на методите на теоретичната химия за:

А. Изясняване на механизми на органични реакции:

Б. Количествено охарактеризиране на реакционната способност на амиди, анилиди и карбамати при реакции на алкална хидролиза:

В. Изчисляване на σ -константите на заместители:

Г. Изясняване на връзката между структура и спектрални свойства на различни флуорофори на базата на 1,8-нафталимиди:

Д. Изследване на структурата и спектралните свойства на различни органични и комплексни съединения:

Бих искал да разгледам научните приноси на гл. ас. д-р Чешмеджиева като развитие на нейните знания, умения и компетенции в областта на теоретичната химия:

А. При първия тип приложения е изследван механизмът на алкална хидролиза на N-монозаместени амиди [публ. 1, 2, 5, 6], което представлява темата на докторската дисертация на гл. ас. д-р Чешмеджиева. Това изследване е на изключително високо научно ниво, за което свидетелстват както наградата от Съюза на Учените в България за високи научни постижения, така и броят цитати на съответните публикации. В последващите работи [публ. 8, 13, 16] кандидатката развива своите умения и компетенции в областта на теоретичното изследване на механизми на реакции и прилагането на комбиниран подход, включващ експериментални техники за доказване на заключенията от изследванията.

Б. При количественото охарактеризиране на реакционна способност на амиди, анилиди и карбамати при реакции на алкална хидролиза за първи път е показано, че атомният електростатичен потенциал (EPN) може да се прилага успешно като индекс на реактивоспособност при химични реакции [публ. 2, 6, 9], което е част от докторската дисертация на кандидатката. Следва развитие на тематиката и сравняване на EPN с други дескриптори на реактивоспособност [публ. 9].

В. При изчисляването на σ -константите на заместители също има задълбочаване на компетенциите на гл. ас. д-р Чешмеджиева: предложен е нов теоретичен метод за изчисляване на индукционните σ_I - и резонансните σ_R -константи на заместители при ароматни съединения [публ. 7]; изследвани са вътрешномолекулните ефекти, определящи σ -константите при ароматни заместители [публ. 12]; теоретично са предсказвани ИЧ интензивностите на база електронни параметри [публ. 11]; приложени са теоретични параметри за количествено описание на реакционната способност при водородно свързване и е дефиниран нов дескриптор на реакционна способност при водородно свързване [публ. 18]; изследвани са ефектите на свръхспрежение с помощта на теорията на функционала на плътността и инфрачервена спектроскопия [публ. 19].

Г. При изясняване на връзката между структура и спектрални свойства на различни флуорофори на базата на 1,8-нафталимиди се забелязва, че гл. ас. д-р Чешмеджиева вече е търсен специалист в областта на теоретичното изследване върху фотофизичните свойства на различни съединения [публ. 14, 15, 17].

Д. Знанията, уменията и компетенциите в научната дейност на гл. ас. д-р Чешмеджиева се усъвършенстват и при изследване на структурата и спектралните свойства на различни органични и комплексни съединения [публ. 4, 20, 21, 22].

4. Преподавателска и проектна дейност

Като преподавател в ХФ – СУ “Св. Климент Охридски” д-р Диана Чешмеджиева участва в разработването на курсове по „Съдебна химия“ и „Статистически подходи в QSAR”, подготвя електронен курс с лекции и задачи „Масспектрален анализ на лекарства“ за нуждите на студентите от магистратура Медицинска химия, активно участва в колектива разработил изцяло нови семинари и упражнения към курса по Фармацевтичен анализ 2, за новата специалност „Фармация“ във Факултета по Химия и фармация.

Гл. ас. д-р Диана Валентинова Чешмеджиева е водила лекции и упражнения на студенти (както бакалаври, така и магистри от различни специалности): лекции по „Инструментални методи в химията 2“, „Компютърна химия“, „Съдебна химия“, „Молекулно моделиране и QSAR“ и упражнения по „Инструментални методи в химията 2“, „Компютърна химия“, „Молекулно моделиране и QSAR“, „QSAR и лекарствен дизайн“, „Компютърни методи в спектроскопията и хроматографията“, „*Ab initio* MO изчисления“, „Фармацевтичен анализ 1 и 2“, „Фармацевтичен анализ“,

„Съдебна химия“. Кандидатката е била научен ръководител на 6 защитили дипломанти и е работила по изпълнението на 8 национални и международни проекти.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ: Гл. ас. д-р Диана Валентинова Чешмеджиева отговаря на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и Правилника за условията и реда за придобиване на академичната длъжност „доцент“ в Факултет по Химия и Фармация при СУ „Св. Климент Охридски“. Представената за участие в конкурса стойностна научна продукция е достатъчна по обем, публикувана е в реномирани научни списания и е намерила широк отзвук в литературата.

Въз основа на гореизложеното, убедено давам своята положителна оценка и предлагам гл. ас. д-р Диана Валентинова Чешмеджиева да бъде избрана за „Доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) към факултета по Химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“.

02.08.2018 г.

Рецензент:

(проф. д-р Николай Василев)