

Становище

**относно кандидатурата на Валя Кирилова Николова
за конкурс за „Доцент” по професионално направление**

4.2. Химически науки (Теоретична химия)

от доц. д-р Ивелина Мирчева Георгиева

Валя Кирилова Николова е единствен участник в конкурса за „Доцент” по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия), обявен от Софийския университет в Държавен вестник, бр. 50 от 15.06.2018 г. Представените документи са изрядни и в пълен комплект според изискванията на ЗРАСРБ. Участникът има придобита образователна и научна степен доктор от 2008 г. по същата специалност на конкурса (4.2. Химически науки (Теоретична химия)). Дисертационният труд на тема: „Атомният електростатичен потенциал като индекс на реактивоспособност при процеси на водородно свързване и химични реакции“, е изработен в катедра Приложна органична химия, Химически факултет, СУ "Св. Климент Охридски" с научен ръководител проф. дхн Борис Гълъбов. В тази катедра от 2005-2011 г. Валя Николова работи като химик, а от 2011 г. досега (~8 год.) е главен асистент в преустроената катедра Фармацевтична и приложна органична химия на Факултета по химия и фармация - СУ. В резултат на последователното кариерно развитие в областта на теоретичната химия в една и съща катедра, г-жа Николова има натрупан 15 години (и 9 месеца досега) трудов стаж по специалността. За целите на конкурса, тя е подготвила и представила хабилитационен труд за доцент на тема „Теоретични изследвания върху процеси на комплексообразване: атомен електростатичен потенциал като индекс на реактивоспособност при водородно свързване; взаимодействия на циклодекстрини с метални йони“ с обем 50 страници. Казаното дотук показва, че кандидатът изпълнява напълно условията съгласно ЗРАСРБ за придобиване на академичната длъжност „доцент“.

Наукометричните показатели (брой статии в реферирани списания и брой цитати), справка за научната и учебната дейност и участие в научни проекти съответстват на допълнителните препоръчителни критерии на ФХФ - СУ. След защитата на дисертационния си труд, публикационната активност на Валя Николова се изразява в 14

съвместни научни публикации в списания с импакт фактор. В седем от тях, кандидатът е на първо място, което по неписано правило е отредено на водещите в изследването учени. Трябва да се отбележи високото ниво на изследванията, позволило публикуването им в реномирани международни списания, *Chemistry - a European Journal* (IF~5.7), *Journal of Physical Chemistry B* (IF~3.2), *Inorganic Chemistry* (IF~ 4.7), *Phys. Chem. Chem. Phys* (IF~ 4.1). В своята цялостна научна кариера досега, Валя Николова е съавтор в 20 научни публикации, 19 от тях са в специализирани списания реферирани в ISI Web of Knowledge или SCOPUS, с импакт фактор. Високата цитируемост (210 цитирания, *h*-Индекс 7) на публикуваните резултати е доказателство за качеството и значимостта на изследванията, както и за международната разпознаваемост на научния колектив с участието на Валя Николова. Активната изследователска дейност на гл. ас. д-р Валя Николова за периода от ~ 10 г. е свързана още с участието ѝ в изпълнението на 5 научни проекта на ФНИ и представяне на научни резултати на 6 международни и национални форума. Учебно-преподавателската дейност на кандидата включва участие в разработване и водене на 2 лекционни курса „Инструментални методи в химията“ за периода 2013-2016 г. и на упражнения и семинари към курсове по „Фармацевтичен анализ“, „Компютърни методи в спектроскопията и хроматографията“, „Компютърна химия“ с годишна учебна заетост над 380 ч. Ръководните качества на кандидата се проявяват през последните 5 години в успешното ръководство на 6 дипломни работи, които са по научна тематика на конкурса. Научноизследователската и учебно-преподавателска дейност на Валя Николова се развива изцяло в нейните тематични научни интереси: приложение на компютърни методи в молекулната спектроскопия, компютърно моделиране на химически системи и процеси и взаимодействия от типа “домакин-гост”.

Основните научни разработки и приноси на кандидата могат да се обобщят в две групи:

Атомен електростатичен потенциал АЕП (публ. 9,14,18). От хабилитационния труд за доцент на кандидата може да се заключи, че теоретичните изследвания на приложението на АЕП са продължили и след дисертационната разработка. Към изследванията от дисертационния труд за АЕП като дескриптор на реактивоспособността при водородно свързване и индекс на реактивоспособност при химични реакции на органични съединения, са добавени нови изследвания по темата. Установено е, че АЕП може да се използва за описване на 1) реактивоспособността на молекулите при процесите

на π -водородно свързване и 2) вътрешномолекулните фактори, свързани с ефектите на свръхспрежение на метиловите групи върху процеса на π -водородно свързване.

Фактори, управляващи процесите на метално свързване и селективност в комплекси на метали от IA, IIA, IIB и IIIA група с циклодекстрини CDs (публ. 15, 16, 17, 19). Посредством квантовохимични изчисления на комплекси на CDs с йони на метали е оценено влиянието на различни фактори (като йонен радиус, електронакцепторни свойства, предпочитано координационно число и степен на хидратация на металния катион, диелектрична константа на средата) върху структурата и термодинамиката на комплексите. Изяснени са факторите, управляващи процесите на метално свързване и селективност в тези системи и факторите, определящи и контролиращи процеса на хидратиране на α -CD.

Коментар: Целесъобразно би било, към основните научни разработки на кандидата в хабилизационния труд за доцент да се посочат съответните публикации, както и по-точно да се дефинира личния принос в съвместните статии.

В заключение, гл.ас. д-р Валя Кирилова Николова има необходимата квалификация и постижения в научноизследователската и учебно-преподавателската дейност, в съответствие с тематиката на конкурса, изискванията на ЗРАСПБ и допълнителните препоръчителни критерии на ФХФ-СУ. Убедено давам положителна оценка и гласувам с „да“ за присъждане на академичната длъжност „доцент“ на гл.ас. д-р Валя Кирилова Николова по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) във ФХФ-СУ.

15.11.2018

Член на Научното жури по конкурса

гр. София

доцент д-р Ивелина Георгиева