
СТАНОВИЩЕ

по конкурс за заемане на академична длъжност „Доцент”
във Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Кл. Охридски“,
професионално направление 4.2. Химически науки,
научна специалност „Теоретична химия”,
обявен в Държавен вестник, брой 63 от 30.07.2021 г.

*от доц. д-р Силвия Емилова Ангелова,
Институт по оптически материали и технологии „Акад. Й. Малиновски“ – БАН,
член на научно жури, назначено със заповед № РД-38-455/21.09.2021
на Ректора на СУ „Св. Кл. Охридски“*

За участие в обявения конкурс във Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“ (ФХФ-СУ) за заемане на академичната длъжност „Доцент” в професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Теоретична химия”, се явява един кандидат - гл. ас. д-р Юлия Русланова Романова.

Комплектът материали, изготвен от кандидата и описан в заявлението за допускане до участие в конкурса, е в съответствие със *Закона за развитието на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ)* и с *Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“*, и включва всички необходими документи. Гл. ас. д-р Юлия Романова е регистрирана в *Регистъра на академичния състав в Република България*, поддържан от Националния център за информация и документация (<https://ras.nacid.bg/dissertation-preview/38450>), където са налични данни за ОНС „Доктор“ и настояща академична длъжност „Главен асистент“. След защита на дисертационен труд за ОНС „Доктор“ на тема „Влияние на средата върху геометрията, електронната структура и магнитните свойства на полианилин“ през 2010 г. и редица следдокторски специализации, през 2018 г. тя е назначена на длъжност „Гл. асистент“ в Катедра „Неорганична химия“ на ФХФ-СУ и заема длъжността към настоящия момент.

Гл. ас. д-р Юлия Романова е съавтор на 4 глави от книги, 24 публикации в научни списания, 2 публикации в пълен текст в сборници от конференции, както и на 1 патент. В настоящия конкурс тя участва с 15 научни труда (14 публикации и 1 глава от книга), публикувани в периода 2010-2021 г. - 8 активни изследователски години и 2 години отпуск по майчинство на кандидата. Всички публикации (14) са публикувани в реферирани и индексирани списания с импакт фактор и са извън докторската дисертация. 9 публикации са в списания от категория Q1, 4 публикации - категория Q2, 1 публикация – в Q4. Намерените цитати на тези публикации са общо 53 към датата на изготвяне на справката от кандидата. Хирш-индексът на гл. ас. д-р Юлия Романова по данни от Scopus и WoS е 11. Гл. ас. д-р Юлия Романова е ръководител на текущ проект с ФНИ и участник в друг проект с ФНИ.

Според справката за научните приноси, изготвена от кандидата за участие в конкурса, от общо петнадесетте научни труда тринадесет включват изследвания на тема “Съвременни материали” и са с приложна насоченост (Статии № 1-9 и 12-15), а останалите два са посветени на изследване на спектроскопски характеристики (Раманови спектри) на молекулите (Статии № 10-11). Според системите, които са изследвани, публикациите на кандидата могат да бъдат разделени в две групи и са посветени на органични молекули с отворена електронна обвивка (Статии № 1, 2, 4, 8, 10, 11, 12, 13) и на органометални комплекси (Статии № 3, 5, 6, 7, 9, 14 и 15). В 6 от представените изследвания кандидатът е първи автор (№ 5-7, 10, 11, 15) а в 5 е кореспондиращ автор (1-5).

За участие в конкурса кандидатът е изготвил хабилитационен труд, написан на 44 страници, с атрактивното заглавие „Наръчник за лов и дизайн на хромофори за синглетно разцепване“. В увода на хабилитационния труд по увлекателен начин и на достъпен език е направен преглед на съвременните соларни технологии, като е посочено, че една от перспективните стратегии за повишаване на ефикасността на соларните клетки е използването на фотофизичен процес, наречен синглетно разцепване (singlet fission). Също така в увода са обяснени основите на този процес и термодинамичните условия, на които трябва да отговаря даден хромофор, за да бъде използван във фотоволтаична клетка на принципа на синглетно разцепване. Направен е обзор на подходите за създаване на хромофори с междумолекулно синглетно разцепване и на стратегиите за преодоляване на ситуацията „търсене на игла в купа сено“, като са изтъкнати преимуществата на мултидисциплинарен подход, представляващ пресечна точка на теоретична/квантова химия, машинно обучение, статистика и наука за данните (data science). Научните приноси на кандидата към тази актуална тематика са публикувани наскоро (2020 г. - публикация №4; 2021 г. – публикация №1) или предстои да бъдат публикувани. При тези изследвания се забелязва тенденция за увеличаване на броя изследвани хромофори - потенциални SF материали и стремеж да бъде намерен бърз и надежден подход за скрийнинг на големи групи съединения:

- За първата група изследвани системи – 14 дибор-дотирани антрацени и фенантрени, изчисленията са проведени на високо теоретично ниво: геометриите са оптимизирани на MP2/aug-cc-pVDZ, дирадикаловият характер на съединенията е изследван посредством PUNF/6-31G** метод, многоконфигурационните пресмятания са проведени с метода RASPT2/aug-cc-pVDZ;
- За втората група изследвани съединения (хинон метиди, 21 на брой) изчислителният протокол включва оптимизация на геометрията на молекулите на ниво B3LYP/6-31G*, изследване на дирадикаловия характер на съединенията отново на ниво PUNF/6-31G**, хеометричен анализ за разработване на класификационен модел за лабораторна стабилност на хинон метидите;
- При третото изследване на кандидата близо 2000 молекули са екстрахирани по зададени критерии от база данни (PubChem PM6 – база данни с 221 милиона молекули с оптимизирани молекулни геометрии и електронни свойства) и са подложени на обработка с квантовохимични и хеометрични методи с цел

разработване на алгоритъм, базиран на машинно обучение, който бързо и нересурсоемко да прогнозира дали дадена молекула е с различен от нула дирадикалов характер, т.е. потенциален хромофор за синглетно разцепване.

Кандидатът прилага в изследванията си широк спектър теоретични методи и е запознат дори с методи, разработени наскоро, което прави отлично впечатление. Получените резултати допринасят за по-задълбочено разбиране на зависимостта структура/свойства на разнообразни химични системи. Темата на хабилитационния труд показва, че кандидатът се е насочил към интересна и предизвикателна област.

По предоставените материали за конкурса нямам критични бележки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

От представената справка за изпълнението на минималните (групи показатели А-Е) и допълнителните изисквания на СУ (група показатели Ж), се вижда, че по всеки от показателите д-р Романова има необходимия брой точки. Общият брой на научните трудове, на които д-р Романова е съавтор (27), е почти двойно по-голям от броя на работите, представени за конкурса (15). Научните постижения на доцент д-р Романова са високи и напълно отговарят на тематиката на обявения конкурс. Тя притежава необходимата научна квалификация, за да продължи да се развива изключително успешно в перспективната област, в която работи задълбочено и систематично.

Представените за участие в конкурса научни трудове, броят на цитатите, участието в проекти и ръководството на проекти от кандидата надвишават изискванията за заемане на академичната длъжност „доцент” според *ЗРАСПБ*, *Правилника за прилагане на ЗРАСПБ*, както и допълнителните изисквания на съответния *Правилник на СУ*. Убедено давам положителна оценка на кандидата и препоръчвам на членовете на Научното жури и на Факултетния съвет на ФХФ-СУ да изберат гл. ас. д-р Юлия Романова за “Доцент” по направление 4.2. Химически науки (“Теоретична химия”).

София

09.11.2021 г.

/доц. д-р Силвия Ангелова/