

РЕЦЕНЗИЯ

от доц. д-р Галя Костова Маджарова

член на научното жури по конкурса за доцент по направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) към катедра по Фармацевтична и приложна органична химия при Факултета по химия и фармация на Софийския Университет “Св. Климент Охридски”, обявен в ДВ бр. 24/16.03.2018 г.

Единствен кандидат в конкурса за доцент по Теоретична химия е гл. ас. д-р Диана Валентинова Чешмеджиева.

Диана Чешмеджиева завършва през 2001 г. магистърска степен в Химическия факултет на СУ „Св. Кл. Охридски”, специалност “Химия”, специализация „Агрохимия“. През 2002 г. печели стипендия по програма „Сократ“ за 4-месечен престой в Лабораторията по теоретична химия в гр. Рен, Франция. През 2009 г. защитава дисертация за ОНС „доктор“ под ръководството на проф. дн Б. Гълъбов и проф. дн Соня Илиева в Катедрата по приложна органична химия към ХФ на СУ. През 2010 г. Съюзът на учените в България отличава дисертацията на д-р Чешмеджиева с Диплом за научни приноси.

Академичната кариера на д-р Чешмеджиева започва през 2004 г. в Катедрата по приложна органична химия. През 2008 г. е назначена за асистент, а от 2010 г. е главен асистент в същата катедра, където е на основен трудов договор и до момента. През 2011 г. работи като пост-докторант в Университет Марсилия, Франция (1 година).

Д-р Д. Чешмеджиева е съавтор на 22 научни труда, като всички публикации са в списания с импакт фактор. По тези публикации са забелязани 172 цитата (справка в WoS). В конкурса се представя с 18 научни публикации, които не са включени в дисертационния труд за придобиване на ОНС „доктор“, като 17 от тях са публикувани, а последната работа е приета за печат. Публикациите са в реномирани международни списания като *Phys. Chem. Chem. Phys.* (IF= 4.123), *J. Mol. Struct.* (IF= 1.54), *J. Phys. Org. Chem.* (IF=1.963), *Tetrahedron* (IF=2.817), *Chem. Eur. J.* (IF= 5.317) и др. Хирш индексът на д-р Чешмеджиева към момента на подаване на документите е h=9. Д-р Чешмеджиева е представила своите научни резултати на 7 международни форума с 1 устен доклад и 7 постерни съобщения. Д-р Чешмеджиева е член на 4 проекта с Фонд „Научни изследвания“, 5 международни проекта и 3 проекта към Структурни фондове.

В материалите по конкурса д-р Д. Чешмеджиева представя хабилитационен труд на тема „Теория в подкрепа на експеримента. Изследване на механизми и реактивоспособност при избрани органични реакции” в обем от 46 страници, в който са обобщени резултатите по две от направленията, в които работи.

Обобщената справка и наукометричните показатели удовлетворяват всички допълнителни препоръчителни критерии на ФХФ за заемане на академичната длъжност „доцент“ и представят д-р Диана Чешмеджиева като разпознаваем изследовател.

Научноизследователска дейност: Научните интереси на д-р Чешмеджиева са фокусирани в областта на квантовохимично моделиране на механизми на химични реакции и предсказване на реактивоспособността на молекули на базата на молекулни дескриптори. Авторската справка за научните приноси отразява правилно резултатите от направените изследвания. Д-р Д. Чешмеджиева е обединила научните приноси на изследванията си в пет групи:

- (1) Приложение на теоретични и експериментални подходи за изясняване на механизми на органични реакции;
- (2) Количествено охарактеризиране на реакционна способност на амиди, анилиди и карбамати при реакции на алкална хидролиза;
- (3) Теоретични подходи за изчисляване на σ константи на заместители;
- (4) Абсорбционни и флуоресцентни свойства на различни флуорофори на базата на 1,8-нафталимиди – модели на заместване, солватохромизъм, приложение;
- (5) други.

Първото направление, приложение на теоретични и експериментални подходи за изясняване на механизми на органични реакции, е продължение и доразвиване на тематиката на дисертационния труд на кандидата. С помощта на теория на функционала на плътността е дадено обяснение на енантиселективността на важна за синтетичната органична химия реакция на Михаел на присъединяване на Шифови бази към α,β -ненаситени кетони [8]. Показано е, че разлика в енергията на стабилизация на предреакционните комплекси е водещият фактор за обяснение на високата диастереоселективност на реакцията на взаимодействие на [(дифенилметил)амино]ацетонитрил и бензилиденацетофенон и липса на такава при взаимодействието на нитрила с 4,4-диметил-1-фенил-1-пентен-3он. С комбинирани

теоретични и експериментални спектрални кинетични техники е проведено изследване на друга асиметрично катализирана реакция на присъединяване по Михаел на α -заместени β -кетоамиди към различни ненаситени карбонилни съединения [16]. В друга работа [13] е изследван механизмът на инициране на полимеризация на лактид с катализатори метални алкоксиди. Реакцията е описана в газова фаза и в разтворител – тетраhydroфуран. Показано е, че вариация в металните йони не повлиява скоростопределящия етап на атака на алкоксида по една от карбонилните групи в лактида. Качествено е охарактеризирана каталитичната активност на изследваните метални алкоксиди.

Второто направление на научните изследвания на д-р Чешмеджиева също е продължение на тематика от изследванията за придобиване на ОНС „доктор“ и е насочено към количествено охарактеризиране на реакционна способност на молекули чрез подходящо подбрани дескриптори. Освен широко утвърдените индекси на реактивоспособност, в изследванията е използван и предложеният от Лабораторията по компютърна химия и спектроскопия нов дескриптор - атомният електростатичен потенциал (EPN). Комбинирането на спектрофотометрично определяне на скоростните константи на серия от заместени карбамати при реакциите им на алкална хидролиза [9] и корелирането им с теоретично изчислени индекси на реактивоспособност е позволило както детайлно разбиране на процеса, така и утвърждаване на предсказващата способност на теорията. Количествено е описано водородно свързване в петте основни бази на нуклеиновите киселини [18] и е предложено абсолютната стойност на енергията на водородно свързване на определена позиция в базите да бъде въведена като нов описател на водородната връзка- Hbdescr . В друга работа [19] са използвани индексите на реактивоспособност, за да се обясни ефектът на свръхспрежение на метиловите групи на π -водородно свързани комплекси на хексаметилбензен с монозаместени феноли. Показано е [11], че може да се направи корелация между интензитета на карбонилното трептене и индексите на реактивоспособност.

В третото направление, теоретични подходи за изчисляване на σ константи на заместители, е предложен нов метод за теоретично определяне на индукционните σ_I и резонансните σ_R константи на заместители при ароматни съединения чрез EPN [7]. Предложеният подход е намерил отзвук в научната литература в областта. Установяването на зависимост между модифицираните Хаметови константи на ароматни заместители и

различни индекси на реактивоспособност позволява да се изясни природата на вътрешномолекулните взаимодействия и количествено да се оцени реактивоспособността на ароматните производни [12].

Четвъртото направление, абсорбционни и флуоресцентни свойства на различни флуорофори на базата на 1,8-нафталимиди – модели на заместване, солватохромизъм, приложение, е посветено на синтез, теоретично и експериментално охарактеризиране на фотофизичните свойства на нови маркери за визуализация на ензимна активност [10, 14], мероцианинови хромофори [15] и флуоресцентни имидазолони производни със синя емисия [17]. Демонстрирана е възможността атомният електростатичен потенциал да се прилага като дескриптор и за системи във възбудено състояние.

Най-новите публикации на д-р Чешмеджиева са в областта на биохимията. С помощта на квантовохимични изчисления е изследвана обмяната на Al^{3+} със серия биогенни метални катиони: Mg^{2+} , Fe^{2+} и Zn^{2+} в моделни системи на активни центрове на протеини. Дадено е обяснение на разликата в токсичността при заместването на нативните с „чужди“ метални йони в някои протеини [20]. Моделирана и обяснена е разликата в свойствата на лекарството SAHA и негови серни и селенови аналози [21,22] Анализирани са афинитетът и селективността на изследваните инхибитори към есенциалните биогенни метални йони.

Представените за рецензия научни трудове могат да бъдат високо оценени, отговарят на тематиката на конкурса и са в областта на теоретичната изчислителна химия. В голяма част от научните публикации на гл. ас. д-р Диана Чешмеджиева са използвани комбинирани експериментални и теоретични охарактеризирания на изследваните системи. Проведените проучвания могат да се отнесат към категориите новост за науката, както и обогатяване на научното познание, като изясняват механизми на химични реакции или предсказват качествено, а на много места и количествено, реактивоспособността на изследваните системи.

Преподавателска дейност: гл. ас. Д. Чешмеджиева преподава в бакалавърско и магистърско ниво на обучение на студентите.

В *бакалавърско ниво* тя води упражнения и е титуляр на лекциите на 3 задължителни и 1 избираем курс за студенти редовно обучение: Инструментални методи в химията 2 (сп. ИХСМ, Р.О., 60 ч. + 30 ч. упр.(КХ), задължителен), Компютърна химия (сп. Хим. и Инф.,

Р.О., 45 ч. + 30 ч. упр., задължителен), Молекулно моделиране с QSAR (сп. КХ, Р.О., 30 ч. + 45 ч. упр., задължителен), Съдебна химия (30 ч. л. + 30 ч. упр., избран).

В *магистърско ниво* д-р Чешмеджиева води упражнения по: QSAR и лекарствен дизайн („Фармация“ и „Медицинска химия“, Р.О., 30 ч., избран); Компютърни методи в спектроскопията и хроматографията (маг. „Съвременни спектрални и хроматографски методи за анализ“, Р.О., 30 ч., избран); *Ab initio* МО изчисления (маг. „Изчислителна химия“ Р.О., 30 ч. избран); Фармацевтичен анализ 1 и 2 (сп. „Фармация“, Р.О., 30 ч. задължителен); Фармацевтичен анализ (маг. „Медицинска химия“, Р.О., 30 ч. задължителен).

Д-р Чешмеджиева е била съ-ръководител на 1 бакалавърска и 5 магистърски успешно защитени дипломни работи.

На *ниво докторанти* в момента е научен консултант на 1 докторант.

Д-р Чешмеджиева е разработила и два електронни курса с лекции и задачи - „Масспектрален анализ на лекарства“, в помощ на студентите от магистратура „Медицинска химия“ и „Статистически подходи в QSAR“. Материалите от електронните курсове са достъпни на страницата за дистанционно обучение на ФХФ и могат да се използват от всички студенти. Д-р Чешмеджиева е участвала активно и в разработването на нови семинари и упражнения към курса по Фармацевтичен анализ 2 за специалност „Фармация“.

Учебната натовареност на д-р Чешмеджиева значително надхвърля задължителния норматив от 270 часа и средно годишно е 400 часа аудиторна заетост. Това показва сериозна ангажираност в образователния процес в катедрата и факултета.

Личните ми впечатления от д-р Чешмеджиева са отлични. Тя е уважаван колега, който умее да работи със студентите. Участва без колебание във всички допълнителни дейности, извън преподавателската работа във ФХФ.

Заключение

Кандидатът в конкурса за доцент, гл. ас. д-р Диана Чешмеджиева, е опитен изследовател в областта на теоретичната химия със стойностна научна продукция и натрупан значителен преподавателски опит.

Представените материали от **д-р Диана Чешмеджиева** съответстват напълно на всички изисквания на Закона, Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски” и на допълнителните критерии за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ за професионално направление „Химически науки”. **Убедено препоръчвам гл. ас. д-р Диана Валентинова Чешмеджиева да бъде назначена на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия).**

31. 07. 2018 г.

Рецензент:

(доц. д-р Галя Маджарова)