

Рецензия

във връзка с конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия, 01.05.01), обявен в ДВ, бр. 51 от 27.06.2017 г.

За участие в конкурса за академичната длъжност „професор“, обявен в ДВ, бр. 51/27.06.2017 г., заявление е подал един кандидат: доц. д-р Анела Николова Иванова. Доц. д-р Иванова е представила всички необходими документи, указани в Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за неговото приложение, Закона за висшето образование, Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“ и Препоръките за критериите при придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ за професионално направление „Химически науки“. Представената документация е подготвена коректно, прегледно и съгласно всички изисквания и препоръки.

Биографични данни, образование и професионален опит. Доц. д-р Анела Николова Иванова е родена на 15.01.1975 г. в София. В периода 1993-1999 г. тя е студент по Химия в ХФ на СУ „Св. Кл. Охридски“. В 1999 г. завършва пълния курс на обучение с отличен успех от положените изпити и защита на дипломна работа, и придобива професионална квалификация „химик“ и специализация по Химична физика и теоретична химия. По време на обучението си тя печели стипендията на Фондация „Еврика“ за най-добър студент на 1996-та година и наградата на Фондация „Св. Климент Охридски“ за „Най-добър студент на СУ в 1999 г. В периода 2000-2004 г., Анела Иванова е докторант в Катедрата по Физикохимия на ХФ на СУ. Въз основа на успешно защитена дисертация на тема *„Теоретично изследване на организацията, електричните и магнитните свойства на амфифилни молекули на границата вода/въздух“* под научното ръководство на проф. д-р Аля Таджер, в 2004 г. ВАК ѝ присъжда образователната и научна степен „доктор“ по научната специалност 01.05.05 Физикохимия. В следващите години, д-р Иванова заема последователно длъжностите „старши асистент“ (2004-2005г.) и „главен асистент“ (2005-2009г.) по Теоретична химия към ХФ на СУ. Едновременно с преподавателската дейност в този период тя провежда интензивни и задълбочени научни изследвания, които оформят нейния профил на учен и специалист в областта на теоретичната химия и квантово химичното моделиране. За нейното научно израстване съществено допринасят специализациите проведени в Института по полимери „Макс – Планк“, Майнц, Германия (стипендии „Мария Кюри“ и „Александър фон Хумболт“ и работни визити), в Техническият университет Мюнхен, Германия (работни визити и стипендия „Александър фон Хумболт“) и в Института за повърхности и фазови граници в Мюлуз, Франция (STSM). След успешен конкурс в 2009 г., ВАК присъжда на д-р Иванова научното звание/академичната длъжност „доцент“ по научната специалност „Теоретична химия“ (Квантова химия), която длъжност кандидатката заема до момента. В същата година е удостоена с наградата на Софийската община за „Най-добър млад учен на СУ „Св. Кл. Охридски“. В периода 2017-2019 г. тя ще бъде приемащ учен на стипендиант на Фондация „Александър фон Хумболт“, което е безспорно международно признание за нейните задълбочени познания по теоретична химия, за натрупания изследователски опит и постижения в областта на молекулното моделиране. Поради

добрите й организационни качества и умението да работи в екип, доц. Иванова е избрана за член на Факултетния съвет, Заместник-декан по учебните въпроси (ОКС „Магистър”), отговорник на специалност Фармация, Председател на Общото събрание на ФХФ на СУ, член на Хумболтовия съюз в България (участие в ръководството на химическата секция на съюза), експерт по оценяване и акредитация към НАОА, експерт към СУ „Св. Климент Охридски“ и НАЦИД по признаване на завършено висше образование в чужбина. Доц. д-р Иванова е съорганизатор на редица симпозиуми и работни срещи: QSCP VI, 6-ти Европейски семинар по квантови системи в химията и физиката, София, 2001 г., Юбилейна конференция „125 години обучение по математика, информатика и природни науки в СУ „Св. Климент Охридски“, София, 2014 г. и 15-ти семинар „deMon Developers“, София, 2015 г.

Обща характеристика на представените материали. Във връзка с участието в конкурса за „професор“, доц. д-р Анела Николова Иванова е представила пълен списък на научните си трудове, който включва 53 публикации и списък на избрани научни трудове за конкурса, който съдържа 24 публикации. Преобладаващата част от публикациите на доц. д-р Иванова (47) са в реномирани международни списания с висок импакт фактор, което е неоспоримо доказателство за тяхното високо качество. От представените за участие в конкурса 24 публикации, само 4 са в списания без импакт фактор, а останалите 20 са в едни от най-реномираните международни списания: *Langmuir* (3), *The Journal of Physical Chemistry A* (2), *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (1), *European Biophysical Journal* (1), *The Journal of Physical Chemistry B* (5), *Journal of Computational Chemistry* (1), *Organic Electronics* (1), *Chemical Physics* (1), *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)* (3), *European Journal of Inorganic Chemistry* (1), *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*. Списъкът с цитиранията на научните трудове на доц. Иванова съдържа 295 заглавия на публикации в областта, които отразяват и доказват качеството, международния интерес и признанието на описаните в публикациите резултати. По данни на кандидата индексът на Хирш е 11.

Научните публикации на доц. Иванова включват авангардни научни разработки, отговарят по брой и качество на условията и темата на конкурса и изпълняват допълнителните препоръчителни критерии за професионално направление „Химически науки” в СУ. Авторската справка е конкретна и много добре очертава собствените приноси на кандидата в публикациите. В съответствие с изискванията на ЗРАСРБ и допълнителните препоръчителни критерии в СУ „Св. Кл. Охридски“, доц. Иванова е представила Хабилизационен труд на тема „Молекулно моделиране на биоструктури и свойства на потенциални компоненти за наноматериали“. Хабилизационният труд е написан на 105 страници и включва: 224 литературни източника, 66 фигури, схеми и диаграми и 21 таблици, които много добре илюстрират получените резултати и по този начин спомагат за тяхното възприемане и правилно разбиране. За всяка група изследвани обекти, доц. Иванова е направила критичен анализ на съществуващите теоретични и експериментални изследвания, поставила е акцент върху това, което не е правено до момента на изследването и така по най-добър начин е аргументирала и разграничила собствените изследвания от известните в литературата. Резултатите са представени стегнато и ясно и завършват с най-съществените резултати и изводи.

Научни приноси. Научните приноси в изследванията на доц. Иванова са в областта на изчислителното молекулно моделиране насочено към разкриване на връзката между структурата (пространствена и електронна) и молекулните и/или надмолекулни свойства на две големи групи системи, биообекти и фрагменти от наноматериали. Получени са нови и недостъпни за експеримента резултати за изследваните обекти, установени са неизвестни до сега корелации, които обясняват и могат да предсказват специфични свойства. Изброените по-долу конкретни научни приноси следват тематичното подреждане на представените в Хабилитационния труд изследвания.

Изчерпателни моделни МД изследвания на монослоеве от дипалмитоил-фосфатидилхолин (DPPC) и дикаприн на водна повърхност, при различни повърхностни концентрации на липидите са довели до извеждането на нови корелации, с помощта на които доц. Иванова е изучила влиянието на размера на моделите върху структурирането на липидите на фазовата граница, влиянието на степента на компресията върху организацията на амфибилите на водната повърхност както и възможността за образуване на нанодомени при определени концентрации. В рамките на същата тема е охарактеризирано поведението на цвитерйонния фосфатидилхолин и неутралния дикаприн. Получени са нови, интересни резултати относно електричните и диелектричните свойства на монослоевите, които са оценени в нормално и тангенциално направление на повърхността, като приносите на последните са посочени за доминиращи. Плътноста на поляризацията е изведена като индикатор за промяна във фазовото състояние на монослоевите. (*публ. № 19, 20*) В друго изследване на доц. Иванова, с иновативни теоретични симулации и подобрен модел е осветлена надмолекулната организация на инвертирана хексагонална мезофаза, изградена от глицеролмоноолеат, трикаприн и вода в присъствие и отсъствие на моделен биотовар (лизозим). Получени са неизвестни до сега теоретични резултати, с които е изяснена стабилизиращата роля на трикаприн молекулите и механизмът, по който се стабилизира мезофазата. Изучено е междумолекулното взаимодействие в глицеролмоноолеат, влиянието на лизозим и ефектът на радиуса на цилиндрите върху структурирането на липидите; предложена е тръба с оптимален размер за пренос на протеина. (*публ. № 4*) Поведението на адсорбирани на водна повърхност неутрални и анионни форми на есцин и кинетиката на спонтанна агрегация на молекулите на повърхността са изследвани чрез класически атомистични МД симулации и подходящи молекулни модели. Установено е, че неутралната форма на есцин бързо се самоорганизира в стабилен клъстер чрез три типа взаимодействия. Теоретично предсказаната разлика в разтворимостта на анионната форма спрямо неутралната е получила потвърждение от експеримента. Разкрита е вътрешномолекулната структура на амфибилите и разположението им спрямо повърхността. (*публ. № 1*)

С цел разработване и валидиране на молекулно-механичен модел на течни масла, съставени от молекули нисковерижни алкани (пентан, хексан и хептан), доц. Иванова провежда концептуално нови теоретични изследвания и предлага оптимизирана изчислителна процедура в рамките на МД, с помощта на която коректно са предсказани структурни и термодинамични свойства на маслата, установено е влиянието на размера на моделите и температурата върху изчислените параметри. Предложени са нови схеми за изчисляване на топлинен капацитет и коефициент на термично разширение. (*публ. №*

10, 11) Друга интересна научна тема, която доц. Иванова разработва посредством МД симулации (umbrella sampling) е процесът на пренос на пентанол, хексанол и хептанол през фазовата граница вода/масло, за описанието на който са изчислени профилите на изменение на свободната енергия за пентан, хексан и хептан. Предсказаните енергии на адсорбция от двете обемни фази на повърхността и енергията на пренос от вода в масло са в добро съответствие с експеримента. Предложени са оригинални методики и за оценка на приноса на отделните функционални групи към промяната на свободната енергия. (публ. № 3) За да бъде намерен подходящ метод за оценка на изменението на свободната енергия чрез МД симулации, в една публикация е направен преглед на известни в литературата изчислителни методи като са посочени предимствата и недостатъците на всеки от тях, а областта им на приложимост е илюстрирана с конкретни примери. (публ. № 7) Със системни теоретични изследвания е доказана необходимостта от отчитане на водното обкръжение за коректен конформационен анализ на олигоетиленгликол с алкилова опашка. Енергията на свързване в стабилните димери, получени от МД симулации, и предпочетените ориентации на молекулите в тях са оценени на квантово химично ниво. (публ. № 13) Друга част от изследванията на доц. Иванова са посветени на изучаването на структурните особености и самоорганизацията в димери на три олигоетиленгликоли с алкилова опашка във воден разтвор. С помощта на окупирани и атомистични МД симулации е установено влияние на удължаването на хидрофилната част върху геометрията на димерите. Енергията на свързване между молекулите в избрани димери и стабилизиращата функция на междумолекулните водородни връзки са оценени квантово химично. (публ. № 16) В друго изследване, с комбинация от квантово химични изчисления и класически МД симулации са моделирани мономери и димери на олигоетиленгликоли с алкилова опашка, с цел извеждане на ММ параметри за наситени етерни фрагменти. Последните са уточнени чрез сравнение на структурни и термодинамични параметри с експеримента и са предложени като преносими за молекули, съдържащи тези фрагменти. (публ. № 17) Изследванията на доц. Иванова върху спонтанната агрегация на соли на жлъчни киселини във воден разтвор и върху механизма на формиране на първични мицели са довели до установяване на интересни зависимости на агрегационното поведение от броя хидроксилни групи в стероловия фрагмент, и от функционализацията на хидрофилната част на молекулите. Тези зависимости могат да се използват за обяснение на биологичната функция на тази група съединения. Показано е, че за стабилизирането на първичните мицели най-голям принос имат хидрофобните взаимодействия. (публ. № 5) След изчерпателен преглед и описание на свойствата, предимствата и недостатъците на няколко типа системи за доставка на лекарства (публ. № 6), теоретичните и експериментални изследвания на доц. Иванова са концентрирани върху антибиотика доксорубин (химиотерапевтик) и негов комплекс с пептид, в който лекарството и пептида са свързани посредством мостов фрагмент. С МД симулации и квантово химични изчисления са изучени в детайли структурите на молекулата на изолираното лекарство, на неговия комплекс с пептида, структурните промени на лекарството в комплекса, както и факторите стабилизиращи комплекса. Установената подвижност на структурите на лекарството и пептида е изведена като важен фактор за ефективното биологично действие. (публ. № 9) На базата на класически МД симулации и квантово

химични пресмятания, доц. Иванова развива комбиниран подход за изчисляване на протонни и въглеродни ЯМР химични отмествания в пептиди. С четири модела на аминокиселини изчерпателно е проследено влиянието на: осредняването по конформери, вида ММ силово поле, типа разтворител, формата на аминокиселините (неутрална или цвитерйонна) и влиянието на противойоните. (*публ. № 8*)

Втората голяма група обекти, изследвани от доц. Иванова включва съединения и комплекси, които могат да бъдат подходящи градивни елементи на нови наноматериали с различни свойства: оптични характеристики на органични TADF емитери за органични светодиоди, магнитни свойства на спин-хибридни комплекси, структура, магнитни и оптични свойства на олигоанилин и структура и електронна плътност на потенциални анодни материали за Li-йонни батерии. Посредством квантово химично моделиране на голям брой донор-спейсър-акцептор структури в основно и няколко възбудени състояния, и чрез пресмятане на техни абсорбционни и емисионни преходи са предсказани структурите и оптичните свойства на нови перспективни съединения с потенциал за приложение като емитери в органични светодиоди. Оценено е влиянието на типа на спейсъра, донора и акцептора, както и на начина на свързване помежду им върху оптичните свойства на системата. Предложената оригинална методология за оценка на факторите, които определят флуоресцентните характеристики на органични TADF (термично активирана забавена флуоресценция) емитери може да се използва за насочен дизайн на нови съединения с потенциал за приложение в органични светодиоди. Изследванията на доц. Иванова в тази актуална област ще продължат с провеждане на МД симулации на основно и възбудени състояния на перспективните съединения. (*публ. № 2, 12*) На базата на квантово химични изчисления на серия моделни метални комплекси на Cu(II) и Mn(II), използвани като фрагменти на молекулни магнити, доц. Иванова е предложила нова изчислителна методика за геометрична оптимизация и оценка на магнитните им свойства чрез подробен анализ на разпределението на спиновата плътност и припокриването на частично заети МО. (*публ. № 14*) За комплексите на Cu(II) е показано определящото значение на симетрията за коректното описание на спиновите им характеристики. Изяснено е влиянието на два торзионни ъгъла върху силата на обменното взаимодействие между металния йон и органичните лиганди. (*публ. № 24*) Новата изчислителна методика е подходяща за обяснение на наблюдавани магнитни свойства или за предсказване на такива при други, вкл. нови комплекси.

Предложен е оптимизиран изчислителен протокол за предсказване на молекулни структури и магнитни свойства на олигомери на емералдиновата сол (ЕС). Анализирани са структурни параметри, разпределение на заряди, относителни енергии и гранични молекулни орбитали на биполаронната и поларонната форма на ЕС. (*публ. № 23*) Влиянието на водното обкръжение е отчетено имплицитно, разгледани са всички възможни мултиплетности на веригите. Установено е характерно за двете форми разпределение на електронната плътност, предсказана е по-голяма стабилност за биполаронната форма и формиране на зависима от разположението на противойоните периодична спинова решетка при най-високите мултиплетности. (*публ. № 18*) Изчислени и интерпретирани са абсорбционните електронни спектри на изолирани олигомери на емералдиновата сол на квантово химично ниво. На базата на МО анализ е изяснен

произходът на електронните преходи, на които се дължи специфичния зелен цвят на ЕС. (публ. № 15)

Геометрията, електронната структура и стабилността на серия бор-заместени и бор,азот-заместени производни на антрацен и фенантрен са изучени с квантово химично моделиране във връзка с тяхното приложение като анодни материали в Li-йонни батерии. Подходящо конструирани модели на избрани стабилни дотирани антрацени и фенантрени с адсорбиран върху различни позиции литиев атом са изследвани детайлно по отношение на енергията на взаимодействие, характера на орбиталното разцепване и преноса на заряд, с цел установяване на структура-свойства корелации. Като системи с оптимални характеристики са предложени нискодотирани бор,азот-антрацени и бор-фенантрени и високодотирани бор-антрацени. (публ. № 21,22)

Проведените от доц. Иванова теоретични и експериментални изследвания и получените от тях резултати и изводи са с висока научна стойност и от съществено значение за обяснение и/или предсказване на свойствата на изследваните групи обекти, както и за насочване на синтеза на нови, непознати за експеримента съединения. Те се отличават с новаторски подход и са извършени с подчертана прецизност и дълбочина, характерни за изследователския стил на автора. За изчисленията са приложени подходящи съвременни изчислителни методи, доказали своята надеждност и ефективност за предсказване на структурни, електронни, магнитни и спектроскопски свойства. Методичните приноси се състоят в предложените иновативни концепции на изследванията и в конструирането на структурните модели на обектите. Доц. Иванова е разработила и успешно приложила редица нови подходи, изчислителни схеми и подобрени изчислителни протоколи, които отчитат спецификата в структурата на молекулно и отвъд молекулно ниво и физикохимичните свойства на изследваните обекти. Следва категорично да се подчертае, че са извършени впечатляващи по обем, системни теоретични и подкрепящи ги експериментални изследвания, в които водещата роля на доц. д-р Иванова е безспорна.

Научни проекти. Участието на доц. д-р Анела Иванова в научно-изследователски проекти е пряко свързано с научно-изследователската ѝ дейност в областта на квантово химичното моделиране. Още от началото на нейната научна кариера, тя е била участник в разработването на редица проекти, финансирани от МОМН (4 бр.), НИС (2 бр.), както и в COST Action P12 от (FP7). На по-късен етап, вече като ръководител на голям брой успешни проекти финансирани от НИС на СУ „Св. Кл. Охридски (6 бр.) и МОН (1 бр.), тя доказва своята компетентност и капацитет да задава теми и ръководи научни изследвания, както и уменията да организира и мотивира екип от учени, които да работят за успешното завършване на проектите. Тя е била също ръководител на работен пакет в проекта „Materials Networking, H2020“ и отговорник на група в проекта BeyondEverest (FP7). Към това следва да се отбележи ролята ѝ на ръководител на приложения за използване на високопродуктивно изчислително оборудване в рамките на проект по Програма Хоризонт 2020 “VI-SEEM”. Участник е още в национални проекти посветени на повишаване качеството на образованието във ФХФ, включващи разработване и провеждане на електронни форми на дистанционно обучение във ФХФ при СУ (по ОП „Развитие на човешките ресурси“), както и изграждане на интердисциплинарни екипи от млади учени в областта на

фундаменталните и приложни научни изследвания от значение за медицинската практика.

Педагогическа дейност. Съществена и впечатляваща част от научната биография на доц. д-р Иванова е нейната преподавателска практика, започнала от началото на научната ѝ кариера в СУ. Благодарение на отличната теоретична подготовка, задълбочените познания върху възможностите на изчислителните методи и прилагането им за решаването на разнообразни химични проблеми, тя е разработила и провежда лекции и упражнения в рамките на редица курсове: «Изследователски практикум», «Курсов проект»; «Квантова химия и спектроскопия», «Молекулен дизайн»; «Квантова химия на молекулни системи»; «Квантова химия и химична връзка», «Строеж на веществото»; «Квантова химия», «Молекулно моделиране на функционални материали»; «Молекулна динамика и Монте Карло симулации»; «Физикохимия с колоидна химия 1»; «Приложение на статистически анализ в молекулярното моделиране». Водила е упражнения по «Строеж на веществото» на бакалаври от Природо-математически факултет на ЮЗУ „Н. Рилски”, Благоевград.

Доц. д-р Иванова е научен ръководител на трима докторанти (1 е защитил, 1 е в процедура по защита и 1 е текущ). Тя е ръководител и съ-ръководител на 6 магистърски и 1 бакалавърска дипломна работа.

Експертна дейност. Високата компетентност на доц. д-р Иванова в областта на теоретичната и изчислителната химия е оценена и на международно ниво с избора ѝ за рецензент на ръкописи, представени за публикуване в едни от най-престижните международни списания в областта на химията. В периода 2012-2015 г. тя е била член на редколегията на Българско списание за химия.

Лични впечатления и заключително становище. Впечатленията ми от доц. д-р Анела Иванова като учен, преподавател и специалист в областта на квантово химичното моделиране са отлични. Тя притежава задълбочени фундаментални познания и дълбок професионализъм доказал се в годините на нейната научна кариера чрез новаторски научни изследвания, ръководство на научни проекти, преподавателска практика и съвместна научно-изследователска работа с колеги от различни научни институции, вкл. международни. На основата на анализа на представените от доц. д-р Анела Иванова документи за участие в конкурса, научни трудове, тяхната значимост, съдържащите се в тях научни и методични приноси, имайки предвид учебната и практика, участието ѝ в научни форуми и разработените от нея научни проекти, убедено предлагам, доц. д-р Анела Николова Иванова да заеме академичната длъжност „професор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) в СУ „Св. Климент Охридски”.

Рецензент:

14.11.2017 г., София

(Наташа Трендафилова, проф. д-р, ИОНХ-БАН)