

Становище

по кандидатурата на доц. д-р Анела Николова Иванова

за професор по 4.2 Химически науки (Теоретична химия), ДВ № 51/2017 г.

от проф. дхн Борис Симеонов Гълъбов

В конкурса за професор, доц. А. Иванова е представила общо 53 научни труда, от които 24 публикувани след присъждането на научното звание „доцент“ през 2009 г. От публикуваните трудове 50 са в авторитетни международни списания с импакт фактор, а 3 в български списания без импакт фактор. Трудовете на Анела Иванова са цитирани общо 295 пъти в специализираната литература. В настоящия конкурс А. Иванова участва с 24 научни труда, от които 21 публикувани в утвърдени международни списания, като например *Langmuir* - 3 статии, *J. Phys. Chem. A* – 2 статии, *J. Phys. Chem. B* – 5 статии, *J. Comp. Chem.*, *Colloids and Surfaces A*, и други. А. Иванова е съавтор и на статия в поредицата *Progress in Theoretical Chemistry and Physics* (2011). А. Иванова, както и ръководени от нея докторанти и дипломанти, са представили общо 113 доклади и постери на научни конференции в чужбина и у нас. Научен ръководител е била на двама успешно защитили докторанти и на редица дипломанти. Понастоящем е ръководител на един докторант. А. Иванова е участвала в изпълнението на общо 17 научни проекта, като е ръководител на 8 от тях. Тези данни характеризират доц. Иванова като международно утвърден учен в областта на теоретичната химия, който продължава да работи интензивно и продуцира научни резултати, намиращи отличен прием в научните списания и в общността от специалисти в областта на изчислителната химия. Като обобщение на резултатите от трудовете, с които участва в конкурса, доц А. Иванова представя и хабилитационен труд озаглавен “Молекулно моделиране на биоструктури и свойства на потенциални компоненти на наноматериали“, написан на 105 страници, включващ библиография от 224 източника.

Публикуваните трудове на доц. Й. Иванова я очертават като специалист с широк обхват на използваните методи на изчислителната химия и разнообразни обекти на изследвания. В проучванията си тя използва методите на квантовата химия, най-често варианти на теорията на плътностния потенциал, но също така и *ab initio* MO изчисления. В редица от изследвания са използвани методи на молекулната динамика, особено подходящи при проучвания върху полемерни или биосистеми. Отличното владение на разнообразни теоретични подходи позволява да се постигнат резултати и за сложни системи, чието охарактеризиране е голямо предизвикателство пред изследователя. Тук следва да се отбележи проучването с помощта на МД симулации на реологичното поведение на адсорбирани върху водна повърхност слоеве от природния сърфактант есцин и спонтанната агрегация на молекулите. Чрез квантово-механични изчисления (ТПФ) са проучени флуоресцентните свойства на серия OLED багрила, като резултатите позволяват да се направят конкретни изводи за структурните вариации, водещи до повишен флуоресцентен добив. Много интересни са и МД симулациите на преноса на алкохоли през фазовата граница вода/масло (пентан, хексан, хептан). Отлично впечатление оставят и редица други проучвания на А. Иванова: върху агрегацията на соли на жлъчни киселини във воден разтвор; съвместното теоретично и експериментално изследване на структурата на доксорубицин (химиотерепевтично средство); създаването с помощта на МД симулации на молекулно-механичен модел на течни масла; теоретичното проучване на донор-акцепторни молекулни системи с оглед евентуалното им използване като органични емитери на светлина; квантовохимичните проучвания върху свойствата на комплекси на Mn(II) и Cu(II) със стабилни органични радикали. Получени са надеждни резултати и върху свойствата на интересни за практиката полимерни системи и техни взаимодействия: олигомери на емералдиновата сол – електропроводяща форма на полианилин, самоорганизацията в димери на три представителя на олигоетиленгликоли с алкилова опашка, адсорбирането на литий върху поликондензирани ароматни системи.

Важно е да се подчертае, че в голямата си част проучванията на Анела Иванова са върху системи с потенциално приложение в технологиите. Тази насоченост на работата и съчетанието с използването на разнообразни теоретични методи подчертава

ефективността на проведените изследванията. Получените резултати са от интерес за широк кръг изследователи от различни области на химията. Използваните подходи са със значение и в методично отношение, тъй като са очертани пътища за приложения на изчислителни методи върху сложни полимерни и биосистеми.

Хабилитационният труд систематизира убедително резултатите от изследванията на А. Иванова.

Представените материали характеризират доц. д-р Анела Иванова като изграден учен в областта на теоретичната химия, получила и международно признание със своите публикации в престижни химически списания и участие в редица научни форуми. Досегашната ѝ дейност илюстрира също така и качествата ѝ на добър научен ръководител.

Доц. Анела Иванова притежава и отлични качества като преподавател. Разработва няколко нови курса, ангажирана е и с развитието на нови магистърски програми. Тя е уважаван колега в Химическия факултет и е ценена високо от студентите.

Всичко изложено по-горе ми позволява убедено да препоръчам на Уважаемото жури и на Факултетния съвет на Химическия факултет да избере доц. д-р Анела Иванова за професор по Химия (Теоретична химия) към Катедрата по физикохимия.

3.11.2017 г.

Подпис:



Проф. дхн Борис Гълъбов