

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Васил Борисов Делчев, кат. Физикохимия, ПУ "П. Хилендарски"
на материали, представени за участие в конкурс за заемане на АД "доцент"
в СУ "Св. Климент Охридски"
в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика;
професионално направление 4.2. Химически науки; научна специалност:
"Теоретична химия".

Кандидат: гл. ас. д-р Мирослава Александрова Недялкова,
кат. Неорганична химия, ФХФ, СУ

Със заповед РД38-446/24.07.2019 г. на Ректора на СУ "Св. К. Охридски" съм избран за член на научното жури (НЖ) по конкурса за заемане на АД "доцент" за нуждите на катедра Неорганична химия към ФХФ при СУ. Конкурсът е обявен в ДВ бр. 52 / 2019 г. На първото неприсъствено заседание на НЖ съм определен да изготвя рецензия върху материалите по конкурса. В него участва един кандидат - гл. ас. д-р Мирослава Александрова Недялкова (кат. Неорганична химия при СУ).

Представеният комплект с документи на хартиен и електронен носител съдържа следните материали: 1) автобиография; 2) диплома за висше образование (само за образователна степен „магистър“, при това с неясно приложение – лошо сканирано) и ОНС „доктор“; 3) допълнително споразумение към трудов договор за заемане на АД „главен асистент“ (2 копия); 4) уверение за трудов стаж; 5) списък на всички публикации и тези, участващи в конкурса; 6) списък публикации от системата „Авторите“; 7) справка за изпълнение на минималните национални изисквания; 8) справки за цитирания и приноси; 9) справка по Чл. 112 (2); 10) научни трудове и резюмета на български и английски език; 11) една монография с претенции за хабилитационен труд; 12) протокол от АС на СУ за разкриване на процедура за АД „доцент“; 13) хабилитационен тезис; и 14) копие от обявата в ДВ.

В комплекта липсват: 1) медицинско свидетелство; 2) свидетелство за съдимост, които са приложими съгласно Чл. 107(1) от Правилника за условията и реда за придобиване на НС и заемане на АД на СУ. Надявам се, че д-р Недялкова е представила тези документи пред съответните служби в СУ.

Биографични данни

Д-р Мирослава Недялкова се дипломира във ФХФ на СУ през 2004 г., образователна степен "бакалавър", спец. "Химия и физика". Не е приложена диплома от тази образователна степен! През 2006 г. придобива образователна степен "магистър", спец. "Химия", професионална квалификация „Магистър по медицинска и фармакологична биофизикохимия“. През 2013 г. д-р Недялкова защитава дисертация в СУ за придобиване на ОНС "доктор" по теоретична химия на тема "Компютърно изследване на наночастици: ефекти на метални йони, разтворител и лимонена киселина". Поради твърде общия характер на темата би било добре да се приложи автореферата на дисертацията!

От 2007 г. до 2016 г. кандидатката заема АД "асистент", а през 2017 г. е избрана на АД "главен асистент" в кат. Неорганична химия на ФХФ на СУ, която заема досега. Д-р Недялкова е посещавала изследователски групи в университети в Испания, Франция и Швейцария, за различен период от време - от няколко дни до няколко месеца. Д-р Недялкова е участвала в мероприятия в ТУ във Виена, групата на проф. Шварц, с цел запознаване с програмата Wien2k - софтуер за изследване на електронната структура на твърди тела с помощта на DFT методи. Приятно впечатление правят множеството награди, които кандидатката е получавала от

български и чужди институции. Участвала е в девет организационни комитета на конференции и проекти.

Научна дейност

Научни трудове

Д-р Недялкова кандидатства с 16 печатни научни съобщения в конкурса за заемане на АД „доцент” – една книга и петнадесет научни публикации. Приложен е хабилитационен тезис на тема „*Multi-scale modeling approach towards the development of nanoQSAR by hemometrics methods*”, представен във ФХФ на СУ „Св. Климент Охридски”. В научните си изследвания кандидатката използва три основни изследователски подхода – химиметричен, молекулно динамичен и квантовохимичен. Голяма част от изследванията са с фундаментален характер, а приносите, според методите и обектите на изследване, имат твърде конкретен характер. С други думи, в приложените статии са докладвани разнородни изследвания на множество обекти, което затруднява формулирането на обобщени приноси. По статиите, представени в конкурса могат да бъдат изброени следните приноси:

1) С помощта на DFT и в среда на разтворител са определени коефициентите на разпределение на група полярни разтворители в двуфазните системи вода/октанол и въздух/октанол (статия 1). На същото теоретично ниво са изследвани геометричните структури и ЯМР спектрите на α - $MnC_2O_4 \cdot 2H_2O$ и γ - $MnC_2O_4 \cdot 2H_2O$, а с молекулна динамика е изучен процесът на дехидратация на $MnC_2O_4 \cdot 3H_2O$ (статия 4). Изчислителни методи са приложени също за изучаване на конформерите на лимонената киселина, като е доказана възможността за вътрешномолекулен протонен пренос през ниски енергетични бариери (статия 11). С молекулна динамика е изследвана (не)стабилността на тънък толуенов филм в контакт с физиологичен разтвор и е установен механизмът на разкъсване на филма при NVT и NPT (статия 10).

2) Чрез кластерен анализ (дескриптори, основани на повърхностните свойства) 1400 хранителни протеина са групирани като „алергени“ и „неалергени“ (статия 2). Направена е оценка на замърсяването на региона около КЦМ – Пловдив с методите на многовариационната статистика (статия 3). Намерени са регресионни модели, отчитащи връзката между екоотоксичност на екстрактите от опаковъчен материал и различни експериментални условия на съхранение и обработка на опаковките (статия 5). Установени са някои физикохимични величини на „зелени“ разтворители (статия 6). Изучени са взаимните връзки между експерименталните условия на екстракционна процедура с бебешки и детски продукти и екоотоксичността им при прилагането на различни екоотоксични биотестове (статия 7). Оценено е влиянието на експерименталните условия върху структурните изменения на някои нанокompозитни системи чрез кластерен анализ (статия 8). Направена е класификация на системи от сребърни наночастици и са дефинирани дискриминатори за класовете на подобие. Оценена е връзката екоотоксичност на частиците – физикохимични свойства (статия 9). С методите на многовариационната статистика е направен опит за различаване на два таксона по морфологични показатели (статия 13). Някои физикохимични величини и композитния състав на боратни стъкла са групирани с помощта на кластерен анализ (статия 14). Екоотоксичността на лекарствени вещества е оценена чрез корелационен анализ (статия 15).

Статия 12 е обзорна. Направен е обзорен преглед на медицинското приложение на наночастици от железен оксид за целите на образната диагностика и на тяхната токсичност. Обзорната статия обхваща 281 литературни източника. Бих искал да знам личния принос на кандидатката.

Повечето статии са с голям авторски колектив и в посочената от кандидатката справка за приносите не става ясно, какъв е личният принос на д-р Недялкова. Тъй

като не познавам д-р Недялкова се затруднявам да преценя каква част от изследванията във всяка статия са нейно лично дело. Моля кандидатката да представи справка за личния принос в посочените от нея публикации.

Прегледът на статиите буди у мен някои въпроси, които са свързани най-вече с подбора на теоретично ниво за провеждане на изчисленията и модел на разтворител. В доста случаи липсва мотивация за прилагането на даден квантовохимичен метод (DFT или MP2) и базисни функции (при изучаването на водородни връзки е повече от препоръчително да се използват дифузни функции на тежките атоми и на водородните атоми). Препоръчвам на кандидатката в нейни бъдещи изследвания да мотивира по-детайлно надеждността на един или друг изчислителен метод и базисен набор.

Друг въпрос е свързан с резултатите от статия 4. В нея авторите твърдят, че са намерили кристалната структура на кристалохидратите на манганов оксалат съгласно изчисления на DFT ниво, но аз никъде не видях в статията параметри на елементарната клетка. Дадена е само пространствената група на $\gamma\text{-MnC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ – $P2_12_12_1$ (примитивна орторомбична Браве клетка). Освен това от фиг. 2 в статия 4 трудно могат да се различат три едноходови дигири.

Относно минималните национални изисквания в професионалното направление на конкурса, по показател В, д-р Недялкова представя пет публикации, равностойни на хабилитационен труд. Три от тях са с квартили Q1, а две с квартили Q2. По този показател са сумирани 115 точки, което надхвърля изискуемия минимум от 100 т. от минималните национални изисквания.

По показател Г д-р Недялкова кандидатства с десет научни публикации. Пет от тях са в списания с квартили Q1 и са публикувани в реномирани научни списания с висок ИФ – над 3. Държа да подчертая, че сред приложените материали не намерих посочени ИФ на списанията, в които кандидатката има публикации. Въпреки, че не са изискуеми в минималните национални изисквания, все пак ИФ на списанията, в които даден учен има публикации е показателен за мястото му в световното научно пространство. Научните съобщения с квартили Q1 имат ИФ=22,17, което е наистина впечатляващо постижение за един млад изследовател.

Четири от статиите по показател Г са отпечатани в списания с квартили Q2. Една статия е в списание с квартил Q3 (съгласно с SCOPUS и WoS), а не Q2, както е определена от кандидатката. Това е статията, отпечатана в *Journal of AOAC International*, 2017, 100:2, 395–364. В този случай редуцирам броя на точките по показател Г с пет - от 255 на 250 т.

Д-р Недялкова участва в конкурса за АД „доцент“ с една монография – книга със заглавие „*Computational study of soft Nanoparticles and effect of ions*“, отпечатана в академичното издателство Lambert (ISBN 978-3-659-87210-5, 2018). Поради липса на автореферат ми е трудно да преценя до каква степен тази монография повтаря резултатите, докладвани в дисертацията за придобиване на ОНС „доктор“. Ще очаквам кандидатката да представи информация по този казус.

Изяви в научни форуми и проекти

Д-р Недялкова има изяви в научни форуми в страната и чужбина. Изнесла е 34 доклада. Тя е участвала в забележително голям брой проекти - 18, на пет от които е ръководител. Кандидатката участва като член на колектива в три дейности по програмата ERASMUS+.

Цитирания

По показател Д, кандидатката участва в конкурса за АД „доцент“ с 30 цитирания. От приложените документи не става ясно кои цитирания са използвани за придобиване на ОНС „доктор“ и заемане на АД „главен асистент“. Например някои от цитиранията са в годината на защита на дисертационния труд, при което е трудно да

се прецени дали част от тях, участващи в настоящия конкурс не се повтарят в предходни процедури (съгласно с ПП на ЗРАС, забележка 7б и 9). В този случай моля кандидатката да даде разяснения по този въпрос! В списъка с цитиранията са посочени такива на статия, която не участва в конкурса (*J. Chem. Physics*, 2012, 137:17, 174701).

Направената от мен справка на цитиранията в SCOPUS и WoS върху всички публикации на кандидатката за периода 2012 – 2019 показва индекс на Хирш $h=4$, като най-цитираната статия в базата данни е *Advances in Colloid and Interface Science*, 2017, 249, 192-212 (по SCOPUS) с 18 цитата, от които само 13 са включени в конкурса. Надявам се в бъдеще този наукометричен показател да нараства, тъй като в момента той има задоволителна стойност за позицията, за която се кандидатства.

Редуцирам точките на кандидатката по показател D с 4 т. (от 60 т. на 56 т.). Мотивите ми затова са следните: цитиране 7 на статия [2] и 2 на статия [6] не се откриват в базите данни SCOPUS и WoS и трябва да бъдат оценени с една точка; цитиране 1 на статия [6] е неясно и непълно и затова го редуцирам от списъка с цитирания.

Учебно-преподавателска дейност

Информацията за учебната и преподавателската работа на д-р Недялкова е твърде оскъдна. От 2016 до 2019 г. всяка учебна година д-р Недялкова е изпълнявала минималния годишен норматив от часове на преподавателите от ФХФ на СУ. Учебната натовареност на кандидатката след заемане на АД „главен асистент“ е свързана с изнасяне на лекционни курсове и ръководство на лабораторни упражнения. Д-р Недялкова е изнасяла лекции на студенти-бакалаври по „Химия на твърдото състояние 2“ и „Обща и неорганична химия 2“. Ръководила е лабораторни упражнения по „Обща химия със стехиометрични изчисления“ и „Обща и неорганична химия 2“ (за чуждестранни студенти) на студенти – бакалаври. Д-р Недялкова е ръководител на един дипломант и консултант на една дисертация. За преподавателския стаж, който кандидатката има, очаквах списъкът с успешно защитили дипломанти да е по-дълъг! Сред документите няма информация за участие на кандидатката в магистърски програми също. Ако е налице очаквам д-р Недялкова да я предостави.

Липсват данни за участие на д-р Недялкова в списването на учебни помагала и разработване на лекционни курсове по задължителни и /или избираеми дисциплини. Препоръчвам на кандидатката в бъдеще да участва по-активно в учебната работа на катедра „Неорганична химия“ на ФХФ при СУ, както и да насочи част от вниманието си към разработване на нови лекционни курсове, включващи теоретичните основи на методите, използвани от нея в научната ѝ работа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените материали по процедурата отговарят на изискванията на ЗРАС в РБ и правилниците за неговото прилагане. Кандидатката е изпълнила минималните национални изисквания в професионалното направление. Тя има своите достойнства и при предоставяне на липсващата информация, посочена по-горе, бих бил склонен да дам положителна оценка за нейната кандидатура и да препоръчам на колегите от Научното жури да предложат на Факултетния съвет на ФХФ на СУ да избере гл. ас. д-р Мирослава Александрова Недялкова на академичната длъжност „доцент“ в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление: 4.2. Химически науки; научна специалност: теоретична химия.

25.10.2019 г.

гр. Пловдив

Изготвил рецензията: