

## СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Николай Георгиев Василев, ИОХЦФ - БАН

на материалите, представени за участие в конкурс

за заемане на академичната длъжност **доцент**

**на СУ „Св. Климент Охридски“**

професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия)

В конкурса за доцент, обявен в Държавен вестник, бр. 50 от 15.06.2018 г. за нуждите на Факултета по химия и фармация на СУ като единствен кандидат участва гл. ас. д-р Валя Кирилова Николова от ФХФ на СУ.

### **1. Общо представяне на процедурата и кандидата**

Гл. ас. д-р Валя Николова работи в момента в катедрата по Фармацевтична и приложна органична химия на Факултета по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“. Тя е завършила висше образование по химия в СУ „Св. Кл. Охридски“ през 2001 г. като Магистър. Защищава докторска дисертация на тема „Атомният електростатичен потенциал като индекс на реактивоспособност при процеси на водородно свързване и химични реакции“ през 2008 г. в същия факултет под ръководството на проф. Борис Гълъбов. От 2005 г. е химик, а от 2011 г. е главен асистент към катедрата по Фармацевтична и приложна органична химия на факултета.

### **2. Обща характеристика на дейността на кандидата**

Гл. ас. д-р Валя Николова е приложила общо 20 научни труда, 19 от които са в международни списания с импакт фактор (IF). Съгласно приложената справка общият брой на цитатите е 210, общият IF е 105.75, а h индексът е 7. Първите 5 от тези статии са включени в докторската и дисертация. Публикации 6-20 са статии публикувани в периода 2012-2018 година след придобиването на образователната и научна степен „доктор“ и са в областта на теоретичната химия.

Научните трудове на кандидатката са публикувани в реномирани международни списания с висок импакт фактор: 1 статия в *Journal of American Chemical Society*, (IF = 8.091 за 2008), 1 статия в *Chemistry a European Journal*, (IF = 5.696 за 2013), 1 статия в *Phys. Chem. Chem. Phys.*, (IF = 4.123 за 2017), 1 статия в *Journal of Computational Chemistry*, (IF = 3.221 за

2017), 1 статия в *Journal of Physical Chemistry* (IF = 2.871 за 2002), 2 статии в *Journal of Physical Chemistry* (IF = 3.177 за 2016), 1 статия в *Journal of Organic Chemistry*, (IF = 2.59 за 2014), 2 статии в *Inorganic Chemistry*, (IF = 4.7 за 2017), 2 статии в *Journal of Molecular Structure*, (IF = 1.404 за 2012), 2 статии в *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, (IF = 0.97 за 2003) и т.н. За високото реноме на списанията, в които са публикувани научните трудове на кандидатката свидетелстват и Q-факторите на списанията: 6 публикации са в списания с Q1-фактор, 4 публикации са в списания с Q2-фактор и 4 публикации са в списания с Q3-фактор.

Научните трудове на гл. ас. д-р Валя Николова представляват приложение на методите на теоретичната химия за изследване на приложението на атомния електростатичен потенциал (АЕП) като индекс на реактивоспособност, за изследване на факторите, контролиращи процесите на комплексообразуване на циклодекстрини с метални йони, както и за моделиране на процеси на конкуренция между различни метални йони в биологични системи.

Съгласно Закона за развитието на академичния състав, представените публикации могат да бъдат разглеждани като “публикации в специализирани научни издания, равностойни на монографичен труд” и “други оригинални научноизследователски публикации”, и са напълно достатъчни за удовлетворяване на изискванията на Закона и препоръчителните изисквания на ФХФ на СУ. Съгласно препоръчителните изисквания на ФХФ на СУ, гл. ас. д-р Валя Николова е представила Хабилизационен труд, в който на 51 страници е обобщила изследванията си по приложението на АЕП като индекс на реактивоспособност и изследванията си относно факторите, контролиращи процесите на комплексообразуване на циклодекстрини с метални йони. Представени и анализирани са резултатите от приложението на АЕП като индекс на реактивоспособност при процеси на водородно свързване, при процеси на  $\pi$ -водородно свързване и при  $S_N2$  обменна реакция на бензилфлуорид с флуорен анион. Обобщени и анализирани са и както резултатите относно факторите, управляващи процесите на метално свързване и селективност в комплекси на метали с циклодекстрини; така и резултатите относно факторите, контролиращи процеса на хидратиране на  $\alpha$ -CD.

Научни трудове на гл. ас. д-р Валя Николова са на много високо научно ниво, отговарят на тематиката на конкурса и са в областта на теоретичната изчислителна химия. В част от научните публикации 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 и предсказват качествено, а често и количествено, реактивоспособността на изследваните системи.

### **3. Преподавателска и проектна дейност**

Гл. ас. д-р Валя Кирилова Николова е сериозно ангажирана както с четенето на лекционни курсове (*Инструментални методи в химията*), така и с воденето на упражнения и семинарни занятия в ФХФ на СУ (*Фармацевтичен анализ, Инструментални методи в химията, Компютърни методи в спектроскопията и хроматографията, Компютърна химия*). Нейната учебна натовареност значително надхвърля задължителния норматив от 270 часа. Кандидатката е била научен ръководител на 6 дипломанта и е работила по изпълнението на 5 проекта на ФНИ на СУ.

### **4. Оценка на личния принос на кандидата**

Личният принос на кандидата в представените научни изследвания за мен е безспорен.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Гл. ас. д-р Валя Кирилова Николова отговаря напълно на предвидените в Закона за развитието на академичния състав в Република България и приетите от Министерския съвет и СУ „Св. Кл. Охридски“ правилници за неговото прилагане, както и на препоръчителните изисквания на ФХФ на СУ за заемане на академичната длъжност „Доцент“. Представената за участие в конкурса стойностна научна продукция е достатъчна по обем, публикувана е в ремирани научни списания и е намерила широк отзвук в литературата. Въз основа на гореизложеното, убедено давам своята положителна оценка и предлагам гл. ас. д-р Валя Кирилова Николова да бъде избрана на академичната длъжност „Доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).

15.11.2018 г.

**Изготвил становището:** .....

проф. д-р Николай Г. Василев