

## РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за заемане на академична длъжност "Доцент" по професионално направление 4.2. Химически науки научна специалност „Теоретична химия” за нуждите на катедра „Фармацевтична и приложна органична химия”, СУ „Св. Климент Охридски, обявен в ДВ, бр. 50 от 15.06.2018г.

**Кандидат:** гл. ас. д-р **Валя Кирилова Николова** от катедра „ Фармацевтична и приложна органична химия към Факултет по Химия и Фармация на Софийския Университет „Св. Климент Охридски“.

**Рецензент:** професор дхн **Цонко Митев Колев**, Институт по молекулярна биология- БАН

В конкурса за "Доцент" по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия)”, катедра „ Фармацевтична и приложна органична химия” при Факултет по Химия и Фармация на СУ-Св. Климент Охридски“участва **само един кандидат – гл. ас. д-р Валя Кирилова Николова** . За участие в конкурса кандидатът е представил пълен комплект от документи в съответствие с изискванията на Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ „СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ. Материалите са подготвени с внимание и са много добре систематизирани.

За участие в конкурса тя е приложила следните документи:

1. Автобиография в 3 екземпляра;
2. Диплома за висше образование и приложение към нея – 3 копия;
3. Диплома за образователна и научна степен „доктор“ – 3 копия;
4. Документ за научно звание или академична длъжност – 3 копия;
5. Удостоверение за трудов стаж по специалността в 3 екземпляра;

6. Списък на публикации, изобретения и други научно-приложни разработки в 3 екземпляра:
- а) списък на научните трудове, представени за участие в конкурса;
  - б) резюмета на всички публикации;
  - в) Списък на публикации, конференции, проекти и научни ръководства, генериран от системата „Авторите“, в случаите когато кандидатът вече заема академична длъжност в СУ „Св. Климент Охридски“;
7. Авторска справка за приносния характер на трудовете в 3 екземпляра;
8. Справка на цитиранията в 3 екземпляра;
9. Медицинско свидетелство, удостоверяващо психичното и физическото здраве – 1 оригинал и 2 копия;
10. Свидетелство за съдимост, удостоверяващо липсата на наложено наказание „лишаване от право да се упражнява определена професия или дейност“ – 1 оригинал и 2 копия;
11. Три комплекта от научните трудове, представени за участие в конкурса;
12. Копие от обявата в Държавен вестник в 3 екземпляра.

Валя Кирилова Николова е родена на 26.02.1976г. в Дупница. Адрес ж.к. Дружба, бл. 109, бх.Б, ет. 8, ап. 30, София 1592. Завършва ХФ на СУ-Св. Климент Охридски“ през 2000 г. От 2000г. до 2005г. Докторант към Катедра Приложна органична химия, Химически факултет, СУ "Св. Климент Охридски. През 2008г. Доктор по 4.2. Химически науки (Теоретична химия), тема на дисертационния труд: „Атомният електростатичен потенциал като индекс на реактивоспособност при процеси на водородно свързване и химични реакции“, научен ръководител проф. дхн Борис Гълъбов. От 2005г. до 2011г. е химик в катедрата. От 2011г. досега Главен асистент, Катедра Фармацевтична и приложна органична химия, Факултет по химия и фармация, СУ "Св. Климент Охридски".

Учебно-преподавателска работа

Лекционни курсове:

1. „Инструментални методи в химията“ за студенти от специалност „Химия“, задочно обучение (IV курс), възложен за първи път през учебната 2013г./2014 г.

2. „Инструментални методи в химията“ за студенти от специалност „Биология и Химия“, редовно обучение (II курс), възложен за първи път през учебната 2015г./2016г

Упражнения и семинари:

1. Участие в колектива разработил изцяло нови семинари и упражнения към курса по Фармацевтичен анализ II част за студенти от специалност "Фармация"; ръководени упражнения и семинари към курса по Фармацевтичен анализ I и II част
2. Ръководени упражнения и семинари към курса по Фармацевтичен анализ за магистърска програма „Медицинска химия“.
3. Ръководени упражнения и семинари към курса по “Инструментални методи в химията” за бакалавърски програми „Компютърна химия“ и “Биология и химия”, и към курса по „Инструментални методи в химията II част” за бакалавърска програма „Инженерна химия“.
4. Ръководени упражнения и семинари към курса „Компютърни методи в спектроскопията и хроматографията“ за магистърска програма „Съвременни спектрални и хроматографски методи за анализ“.
5. Ръководени упражнения и семинари към курса по “Компютърна химия” за бакалавърска програма „Химия и информатика“.

Над 380 ч. средна аудиторна заетост за последните 5 години

Списък на научните трудове на гл. ас. д-р Валя Николова

Публикации:

1. **V. Dimitrova**, S. Ilieva, B. Galabov, “Electrostatic potential at atomic sites as a reactivity descriptor for the hydrogen bonding complexes of monosubstituted acetylenes and ammonia”, *Journal of Physical Chemistry A*, 106, (2002), 11801-11805.

IF\* = 2.871 (2002); брой цитати: 50

2. **V. Dimitrova**, S. Ilieva, B. Galabov, “Electrostatic potential at nuclei as a reactivity index in hydrogen bond formation. Complexes of ammonia with C-H, N-H and O-H proton donor molecules”, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, 637, (2003), 73-80.

IF = 0.97 (2003); брой цитати: 18

3. B. Galabov, P. Bobadova-Parvanova, S. Ilieva, **V. Dimitrova**, „The electrostatic potential at atomic sites as a reactivity index in the hydrogen bond formation“, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, 630, (2003), 101-112.

IF = 0.97 (2003); брой цитати: 39

4. **V. Dimitrova**, S. Ilieva, B. Galabov, „A quantitative characterization of the reactivity of substituted phenols for the proton transfer reaction“, *Bulgarian Chemical Communications*, 37(4), (2005), 356-360.

IF = 0.349 (2005); брой цитати: 0

5. B. Galabov, **V. Nikolova**, J. Wilke, H. F. Schaefer, W. Allen, „Origin of the S<sub>N</sub>2 benzylic effect“, *Journal of American Chemical Society*, 130, (2008), 9887-9896.

IF = 8.091 (2008); брой цитати: 59

6. D. Cheshmedzhieva, **V. Dimitrova**, B. Hadjieva, S. Ilieva, „Rationalizing IR intensities in terms of electronic parameters“, *Journal of Molecular Structure*, 1009, (2012), 69-73.

IF = 1.404 (2012); брой цитати: 2

7. **V. Nikolova**, D. Cheshmedzhieva, S. Ilieva, B. Galabov, „The nature of intramolecular interactions determining the  $\sigma$ -constants for aromatic systems“, *Journal of Molecular Structure*, 1023, (2012), 31-36.

IF = 1.404 (2012); брой цитати: 1

8. B. Galabov, **V. Nikolova**, S. Ilieva, „Does the molecular electrostatic potential reflect the effects of substituents in aromatic systems?“, *Chemistry a European Journal*, (2013), 5194- 5155.

IF = 5.696 (2013); брой цитати: 17

9. **V. Nikolova**, S. Ilieva, B. Galabov, H. F. Schaefer, „Experimental measurement and theory of substituent effects in  $\pi$ -hydrogen bonding: complexes of substituted phenols with benzene“, *Journal of Organic Chemistry*, 79, (2014), 6823-6831.

IF = 2.59 (2014); брой цитати: 13

10. **V. Nikolova**, B. Galabov, „Effects of structural variations on the hydrogen bond pairing between adenine derivatives and thymine“, *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, 34(1), (2015), 159-167.

IF = 0.40 (2015); брой цитати: 1

11. **V. Nikolova**, S. Angelova, N. Markova, T. Dudev, „Gallium as a therapeutic agent: a thermodynamic evaluation of the competition between Ga<sup>3+</sup> and Fe<sup>3+</sup> ions in metalloproteins“, *Journal of Physical Chemistry B*, 9 (120), (2016), 2241-2248.

IF = 3.177 (2016); брой цитати: 6

12. T. Dudev, **V. Nikolova**, „Determinants of Fe<sup>2+</sup> over M<sup>2+</sup>(M=Mg, Mn, Zn) Selectivity in non-heme proteins“, *Inorganic Chemistry*, 55 (24), (2016), 12644-12650.

IF = 4.7 (2016); брой цитати: 1

13. **V. Nikolova**, D. Cheshmedzhieva, S. Ilieva, B. Galabov, „Hydrogen bonding reactivities of atomic sites in the nucleobases“, *Bulgarian Chemical Communications*, 49, Special Issue D, (2017), 8-18.

IF = 0.238 (2017); брой цитати: 0

14. **V. Nikolova**, B. Galabov, „Theoretical vs. experimental IR frequency shifts upon  $\pi$ -hydrogen bonding: complexes of substituted phenols with hexamethylbenzene“, *Contributions, Section of Natural, Mathematical and Biotechnical Sciences, MASA*, 38(1), (2017), 33-41.

IF = няма; брой цитати: 0

15. **V. Nikolova**, S. Angelova, T. Dudev, „IIA/IIB group metal cations hosted by  $\beta$ -cyclodextrin: a DFT study“, *Bulgarian Chemical Communications*, 49, (2017), 189-194.

IF = 0.238 (2017); брой цитати: 0

16. S. Angelova, **V. Nikolova**, N. Molla, T. Dudev, „Factors governing the host-guest interactions between IIA/IIB group metal cations and  $\alpha$ -cyclodextrin: a DFT/CMD study“, *Inorganic Chemistry*, 56, (2017), 1981-1987.

IF = 4.7 (2017); брой цитати: 1

17. S. Angelova, **V. Nikolova**, T. Dudev, „Determinants of the host-guest interactions between  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -cyclodextrins and group IA, IIA and IIIA metal cations: a DFT/PCM study“, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19, (2017), 15129-15136.

IF = 4.123 (2017); брой цитати: 0

18. S. Angelova, **V. Nikolova**, S. Pereva, T. Spassov, T. Dudev, „ $\alpha$ -cyclodextrin: how effectively can its hydrophobic cavity be hydrated?“, *Journal of Physical Chemistry B*, 121, (2017), 9260-9267.

IF = 3.146 (2017); брой цитати: 2

19. B. Galabov, **V. Nikolova**, D. Cheshmrdzhieva, B. Hadjieva, H. F. Schaefer III, „Hyperconjugative effects in  $\pi$ -hydrogen bonding: theory and experiment“, *Journal of Computational Chemistry*, 39 (10),(2018), 527-534.

IF = 3.221 (2017); брой цитати: 0

20. S. Angelova, **V. Nikolova**, T. Dudev, „Divalent metal ions to lactose: a DFT computational study“, *Bulgarian Chemical Communications*, 50, (2018), 126-130.

IF = 0.238 (2017); брой цитати: 0

Други:

1. **Валя Николова**, „Атомният електростатичен потенциал като индекс на реактивоспособност при процеси на водородно свързване и химични реакции“, Автореферат на дисертация за присъждане на образователната и научна степен "доктор" по 4.2. Химически науки (Теоретична химия), 2008г.

2. **Валя Николова**, „Теоретични изследвания върху процеси на комплексообразване: атомен електростатичен потенциал като индекс на реактивоспособност при водородно свързване; взаимодействия на циклодекстрини с метални йони“, Хабилизационен труд, 2018г.

Сред научните съобщения безспорно блести статия №5, публикувана в *Journal of American Chemical Society*, съвместно със световно извесният учен теоретик - Н. F. Schaefer. Тази статия е цитирана 59 пъти и списанието е с най-висок IF = 8.091. Високо оценявам и статия № 1 публикувана съвместно с проф. Гълъбов и Соня Илиева в *Journal of Physical Chemistry A*, IF\* = 2.871 (2002) и цитирана общо 50 пъти. Статия 3 е публикувана в *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, и въпреки сравнително скромния IF = 0.97 (2003); е цитирана 39 пъти. Моята оценка за тази работа е много добра! Работа 8, публикувана в *Chemistry a European Journal*, (2013), с висок IF = 5.696 (2013) добре цитирана:17 цитати. Към този списък бих добавил и работа 9, **V. Nikolova**, S. Pieva, B. Galabov, H. F. Schaefer, „Experimental measurement and theory of substituent effects in  $\pi$ -hydrogen bonding: complexes of substituted phenols with benzene“ публикувана в *Journal of Organic Chemistry*, IF = 2.59 (2014); брой цитати: 13. Съвместната работа на д-р Николова с проф. Тодор Минков №12. T. Dudev, **V. Nikolova**, „Determinants of Fe<sup>2+</sup> over M<sup>2+</sup>(M=Mg, Mn, Zn) Selectivity in non-heme proteins“, *Inorganic Chemistry*, IF = 4.7 (2016); брой цитати: 1. Изследването е публикувано скоро но списанието е много престижно и без съмнение работата ще бъде цитирана. Останалите публикации на кандидата са също стойностни но засега коментиранияте дотук изследвания се открояват. В публикации 1, 2, 4, 7, 9, 10, 11, 13, 15, кандидатът е първи автор. В трудове 5, 6, 8, 12, 16, 17, 18, 19 и 20 тя е на второ място. Оценявам личния принос на кандидата като съществен и важен. Смятам, че развитието на д-р Валя Николова като високо квалифициран химик-теоретик се дължи до голяма степен и на сътрудничеството с големите учени като Н. F. Schaefer J. Wilke, и W. Allen. Валя

Николова е ученик от школата на проф. Борис Гълъбов и с приносите си в развитието на „Атомният електростатичен потенциал като индекс на реактивоспособност при процеси на водородно свързване и химични реакции“ е достоен продължител на традициите в изчислителната химия във факултета по Химия и Фармация. Списъкът с цитиранията на кандидата е 16 страници, т.е. не е възможно да се побере в стандартна рецензия. Обобщената справка за цитиранията на гл. ас. д-р Валя Николова е дадена по-долу. 20 публикации са цитирани 210 пъти. Всяка работа е цитирана средно повече от 10 пъти. Това е високо постижение, което далеч надхвърля изискванията за хабилизация. Тези постижения на кандидата го определят като изграден и признат в научната общност учен, способен да се справя самостоятелно с научни проблеми в теоретичната химия да сравнява обективно данните от експеримента и от изчисленията и да прави обосновани изводи за структурата и свойствата на изследваните обекти.

Цитирани публикации	Цитати по Scopus	Общо цитати
1. <i>Journal of Physical Chemistry A</i> , 106, (2002), 11801-11805.	44	50
2. <i>Journal of molecular structure (Theochem)</i> , 637, (2003), 73-80.	16	18
3. <i>Journal of molecular structure (Theochem)</i> , 630, (2003), 101-112.	34	39
4. <i>Journal of American Chemical Society</i> , 130, (2008), 9887-9896.	51	59
5. <i>Journal of molecular structure</i> , 1009, (2012), 69-73.	2	2
6. <i>Journal of molecular structure</i> , 1023, (2012), 31-36	1	1
7. <i>Chemistry a European Journal</i> , (2013), 5194-5155.	17	17

8.	<i>Journal of Organic Chemistry</i> , 79, (2014), 6823-6831.	13	13
9.	<i>Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering</i> , 34(1), (2015), 159-167.	1	1
10.	<i>Journal of Physical Chemistry B</i> , 9 (120), (2016), 2241-2248.	6	6
11.	<i>Inorganic Chemistry</i> , 55 (24), (2016), 12644-12650.	1	1
12.	<i>Inorganic Chemistry</i> , 56, (2017), 1981-1987.	1	1
13.	<i>Journal of Physical Chemistry</i> , 121, (2017), 9260-9267.	2	2
<b>Общо:</b>		<b>189</b>	<b>210</b>

Авторската справка гл ас. д-р Валя Кирилова Николова е направена върху 20 научни публикации, които съответствуват на тези от списъка. От които 19 са в реферирани и индексирани списания с общ импакт фактор (IF) **48.526**, 1 е в реферирано списание без импакт фактор. Пет от публикациите [1-5]\* са използвани за придобиване на образователната и научна степен "доктор". Включването им в настоящата справка се обосновава от продължаването на изследванията в съответната тематика и след защита на дисертационния труд. Аз приемам този подход, поради логичната връзка между изследванията от дисертационния труд и тези след него. Към момента на подаване на документите са забелязани общо **210** цитата (**189** по Scopus), както обикновено цитатите по Scopus са по-малко от общия брой такива по различни причини. В случая 21 цитата са около 10 %, което е значително изоставане на Scopus. h-индексът на кандидата е 7.

Част от получените резултати са включени в 6 дипломни работи и са представени на 6 международни и национални конференции.

Представените трудове са в областта на теоретичната химия. Една част от научната работа е свързана с изследване на приложението на атомния електростатичен потенциал (АЕП)



като индекс на реактивоспособност, а друга част – с изследване на факторите, контролиращи процесите на комплексообразуване на циклодекстрини с метални йони.

Според мен научните приноси на кандидата биха могли да се групират тематично в четири основни направления:

I. Приложение на АЕП като индекс, описващ реактивоспособността на молекулите при процесите на водородно и  $\pi$ -водородно свързване [1, 2, 3, 9, 10, 13, 14, 19].

II. Изследване на приложението на АЕП при химични реакции и при анализиране на природата на ефектите на заместителите в ароматни системи [4, 5, 6, 7, 8].

III. Изясняване на факторите, управляващи процесите на комплексообразуване на циклодекстрини и метални йони [15, 16, 17, 18].

IV. Моделиране на процеси на конкуренция между различни метални йони в биологични системи [11, 12, 20].

Отбелязвам, че номерацията на публикациите съответства на списъка с научни трудове на кандидата. Приемам научните приноси на д-р Николова и високо ги оценявам.

#### *Критични бележки:*

При разглеждане на материалите по конкурса не забелязах съществени грешки.. Забелязах дребни правописни грешки, които не омаловажават стойността на представените постижения на кандидата. Сравняването и дискусията на данните от пресмятанията с тези от единствения „абсолютен“ метод –монокристалната Рентгенова дифракция би направило постиженията на кандидата още по-значими но това не винаги е възможно. Смятам, че научните приноси са малко по-обширно написани но това не намалява тяхната стойност.

Критичният анализ на научните публикации на кандидата показва, че д-р Валя Кирилова Николова е изграден учен в областта на теоретичната химия със солидни познания по спектроскопия и спектрохимия способна самостоятелно да решава научни проблеми в областта на изчислителната и физичната органична химия.

## Заклучение

Представените от кандидата публикации са по темата на конкурса и представляват оригинални научни разработки със значителен принос в областта на изчислителната и приложна физична органична химия – ИЧ спектроскопията и спектрохимията. Изследванията са проведени на високо научно ниво, като са използвани state-of-the-art експериментални и теоретични подходи. Хвърлят светлина върху нови аспекти от изчислителната химия и спектрохимията на изследваните класове от молекули. Приложените материали по конкурса ми дават основание да смятам, че кандидатът е изграден учен с дълбоки познания и практически умения от областта на изчислителната органична химия, както и инструменталните методи. Д-р Валя Николова демонстрира творческо мислене и умение да подбира и решава успешно задачи от съществено значение за науката и практиката. В заключение, в резултат на гореизложеното считам убедено, че със своята научна и научно-преподавателска дейност гл. ас. д-р Валя Кирилова Николова напълно отговаря на всички изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност „Доцент“. Убедено предлагам тя да бъде избрана за Доцент към Катедра Фармацевтична и приложна органична химия, на Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски.

14 ноември, 2018 г.

/ Проф. дхн Цонко Колев /