



ПРОФ. ДХН ГЕОРГИ Н. ВАЙСИЛОВ

Софийски университет "Свети Климент Охридски"
Факултет по Химия и Фармация, катедра "Органична химия и фармакогнозия"
Бул. Дж. Баучер 1, София 1124, България
Тел.: (+359 2) 81-61 338, Факс: (+359 2) 962-54-38
E-mail: gnv@chem.uni-sofia.bg

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Георги Николов Вайсилов

Факултет по химия и фармация на Софийския университет

по конкурса за професор по професионално направление 4.2 „Химически науки”
(Теоретична химия) за нуждите на Факултета по химия и фармация на СУ „Св.
Климент Охридски”

обявен в ДВ бр. 51, от 27.06.2017 г.

с кандидат доц. д-р Анела Николова Иванова

В конкурса за професор участва само един кандидат - доц. д-р Анела Николова Иванова, която в момента работи като доцент в катедрата по Физикохимия на Факултета по химия и фармация на Софийския университет. Тя е завършила висше образование по химия в Химическия факултет на СУ „Св. Кл. Охридски” през 1999 г. със специализация „Химична физика и теоретична химия“. Защищава докторска дисертация на тема: „Теоретично изследване на организацията, електричните и магнитни свойства амфифилни молекули на границата вода/въздух“ през 2004 г. в същия факултет. От 2004 до 2009 г. е старши и главен асистент към катедрата по Физикохимия на Химическия факултет, а от 2009 г. досега е доцент в същата катедра. За нейното научно развитие са допринесли няколко дългосрочни специализации финансирани от фондация Александър фон Хумболт, Германия (в Техническия университет в Мюнхен, Германия, под ръководството на проф. N. Roesch, 2006-2007) и програмата Мария Кюри на Европейския съюз (в Макс Планк Института за Полимерни изследвания в Майнц, Германия под ръководството на проф. M. Baumgarten, 2001-2002). Тя е осъществила и редица краткосрочни специализации на посочените по-горе места, както и в Института по повърхности и интерфейси в Мулюз, Франция, при проф. Н. Господинова.

Научните приноси на доц. Иванова са публикувани в 53 публикации в реферирани международни и национални издания (две от които под печат по време на подаване на документите). Съгласно приложената справка, към датата на

подаване на документите за конкурса h индексът на кандидата е 11 като публикациите ѝ са цитирани 295 пъти. За конкурса тя участва с 24 публикации, които не са били включени в материалите за конкурса доцент или за образователната и научна степен доктор. От тези публикации 19 са в списания с импакт фактор, като списанията са подбрани много подходящо според проблематиката на съответното изследване. Пет от представените трудове са публикувани в списания без импакт фактор или част от книга. Резултатите от изследванията са представени на множество национални и международни научни форуми както от кандидата, така и от нейни съавтори.

Хабилитационния труд, включен в материалите по конкурса, обобщава изследванията на доц. Иванова в двете основни области, в които тя работи през научната си кариера:

- моделирането на повърхностно-активни вещества и биоструктури във вода и
- моделиране на свойствата на потенциални компоненти за наноматериали.

Хабилитационният труд е написан на 107 страници, от които 8 страници въведение и 10 страници библиография. По съдържание и задълбочен анализ на представените резултати, трудът доближава характеристиките на дисертационен труд за научната степен доктор на науките.

Първата група изследвания, представена и в първата част от хабилитационния труд, е продължение на изследванията на доц. Иванова от докторската дисертация и конкурса за доцент. Тази тематика включва изследвания на биомолекули и на повърхностно активни вещества във вода, моделирани с методите на молекулната динамика с класическо описание на взаимодействията между частиците. За определяне на енергиите на взаимодействие и спектрални характеристики на отделни системи са използвани и подходящи квантово-химични методи. При конструирането на моделите за изследванията са балансирани изискванията за съответствие с реалните експериментално изследвани системи и използваните изчислителни ресурси. Поради липса на параметри за описание на част от моделираните системи, като компонент от изследванията е включена процедура за определяне на такива параметри и тяхното валидиране. По тази процедура са определени параметри в силово поле за етерни групи. Получените от различните молекулно динамични симулации резултати показват добро съответствие с експериментално наблюдавани характеристики на моделираните системи и предлагат обяснение на наблюдавани явления на основа на междумолекулните взаимодействия.

Втората основна област на изследвания на доц. Иванова, включена в материалите по конкурса и в хабилитационния труд, обхваща моделиране на молекулни структури и комплекси, които имат потенциални приложения като компоненти за нови наноматериали със специфични свойства. Тази група изследвания са основани на приложението на квантово-химични методи с различни комбинации от изчислителен метод и базис. Като обекти за изследване са избрани няколко различни типа материали и техни потенциални приложения:

- определяне на структура и на електронните и оптични характеристики на молекулни фрагменти, подходящи за нови емитери на светлина с приложение като органични светодиоди. При тези изследвания е използвана теорията на функционала на плътността в нейния зависещ от времето вариант. Намерени са закономерности, свързващи структурата на отделните молекулни фрагменти и връзката между тях с електронните характеристики и енергията на излъчваната светлина. Резултатите от изследванията са основа за целенасочен дизайн на нови органични емитери в сътрудничеството с партньори от Института за изследване на полимери в Майнц.

- изясняване на магнитните свойства на хибридни комплекси включващи преходен метален йон (Cu^{2+} , Mn^{2+}) и органични радикали като лиганди. Точното описание на подобни системи с отворена обвивка е особено сложно поради различните възможни спинови състояния и възможности за разположение на несдвоените електрони както към металния йон, така и в лигандите. Висока оценка заслужава фактът, че проблемите са решени успешно и е предложен и валидиран изчислителен протокол, който дава коректни резултати и позволява предсказване на структурата и електронните и магнитни характеристики на подобен тип комплекси.

- изследване на електронни, магнитни и оптични характеристики на олигомери на електропроводящата форма на полианилин. Тези изследвания са проведени с методите на Хартри-Фок и на теорията на функционала на плътността с различни обменно-корелационни функционали. Подобно на предната група изследвания, специално внимание е отделено на системи с отворена обвивка и на разположението на несдвоените електрони по веригата на олигомера. Симулирани са и оптичните характеристики на различните форми на олигомерните молекули.

- моделиране на графено-подобни фрагменти като потенциални компоненти за анодни материали в Li-йонни батерии. Изследванията са проведени с метода MP2, основан на теория на пертурбациите, който е подходящ за тези системи. Като моделни системи са избрани антрацен и фенантрен като е изследвано влиянието на

включване на хетероатоми – азот или бор, в ароматните ядра. Анализирани са предпочетените позиции за заместване, енергията на свързване на литиевите центрове, както и преноса на заряд метал-ароматен фрагмент.

Оценявам високо изследванията, включени в публикациите, които са представени в рамките на конкурса, и в хабилитационния труд. Представените изследвания са оригинални и са по темата на конкурса. Всички 24 от работите са публикувани след получаване на научното звание доцент през 2009 г. Научните резултати, описани в тях, могат да се отнесат към категориите новост за науката и обогатяване на съществуващите знания. Впечатлен съм от широкия и целенасочен подбор на моделни системи за изследване, тясната връзка с експериментални проблеми, задълбочения анализ на получените резултати и полезните и конкретни практически препоръки.

Като преподавател в Софийския университет доц. Иванова е водила редица курсове за студенти в бакалавърска и магистърска степен на Химическия факултет, и съответно Факултет по химия и фармация. Тематиката на курсовете е в областта на нейните научни интереси – Квантова химия, Строеж на веществото, Молекулно моделиране и др. Водила е курсове и в други университети. Тя е била научен ръководител на трима докторанти, един от които към момента на подаване на документите за конкурса е защитил. Била е и ръководител и съ-ръководител на шест магистърски и една бакалавърска дипломна работа. Доц. Иванова участва активно в проектна дейност като ръководител и участник в проекти за научни изследвания с национално, европейско и университетско финансиране. Към момента е ръководител на проект към Фонд „Научни изследвания“ на тема „Лекарствени вектори-бионосители: ефективност чрез разбиране“ и е член на комитета за управление на проект на Факултета по химия и фармация по програмата на Европейския съюз „Хоризонт 2020“.

Доц. Иванова е член на Факултетния съвет на Химически факултет/Факултет по химия и фармация от 2011 г. до момента. През периода 2013-2015 г. е била заместник-декан на Факултета като отговаря за новата за Факултета специалност Фармация, а от 2015 г. тя е председател на Общото събрание на Факултета. Като стипендиант на фондация Александър фон Хумболт, доц. Иванова участва в дейността на Хумболдтовия съюз в България и през периода 2013-2015 г. е член на ръководството на химическата секция на Съюза. Искам специално да отбележа, че доц. Иванова е домакин - приемащ учен, на д-р Kai Exner, постдокторант - стипендиант на фондация Александър фон Хумболт по програмата Feodor Lynen.

Съгласно Закона за развитието на академичния състав, предложенията за хабилитационен труд, както и представените научни публикации за конкурса, могат да бъдат разглеждани като “монографичен труд или 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 на изискванията на Факултета по химия и фармация на СУ.

Познавам кандидатката лично, както от работата ѝ във Факултета по химия и фармация на СУ и Химическия факултет на Техническият университет в Мюнхен, така и от множество обсъждания по изследователски проблеми и работа по общофакултетни проекти. Личните ми впечатления от нея са отлични.

В заключение, доц. д-р Анела Иванова и нейните научни приноси отговарят на изискванията на Закона, Правилника на Софийския университет „Св. Климент Охридски“ и на препоръчителните изисквания на Факултета по химия и фармация на СУ за заемане на академичната длъжност Професор. Тя е водещ специалист в областта на теоретичната химия и по-специално в квантово-химичното и молекулно-механично моделиране на различни типове химични и биохимични системи. Въз основа на гореизложеното предлагам доц. д-р Анела Николова Иванова да бъде избрана за Професор по професионално направление 4.2 „Химически науки” (Теоретична химия) във Факултета по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски”.

17.11.2017 г.

проф. дхн Георги Н. Вайсилов