

НАУЧНИ ПРИНОСИ

на гл. ас. д-р ЮЛИЯ РОМАНОВА

ФАКУЛТЕТ ПО ХИМИЯ И ФАРМАЦИЯ

СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ „СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ“

18.09.2021

I. ОБОБЩЕНИ ДАННИ

Julia Romanova; <https://orcid.org/0000-0001-6668-0879>, Author ID (Scopus): 36832298900

Общ брой научни приноси в периода 2009-2021:

24 научни публикации в списания с IF и SJR (24 от тях индексирани в Scopus)

4 глави от книги (1 от тях индексирани в Scopus, 2 в Web of Knowledge)

2 статии от сборник на конференция без IF и SJR (неиндексирани)

1 патент

31 статии (10 като първи автор и 8 като кореспондиращ автор)

Общ брой научни приноси за участие в конкурса в периода 2010-2021:

14 научни публикации в списания с IF и SJR (14 от тях индексирани в Scopus)

1 глава от книга

15 статии (6 като първи автор и 5 като кореспондиращ автор)

Общ брой цитати в периода 2007-2021:

249 с изключени автоцитати от всички автори (Фигура 1)

h-index = 11**, достигнат за 13 години изследователска кариера (Фигура 2)

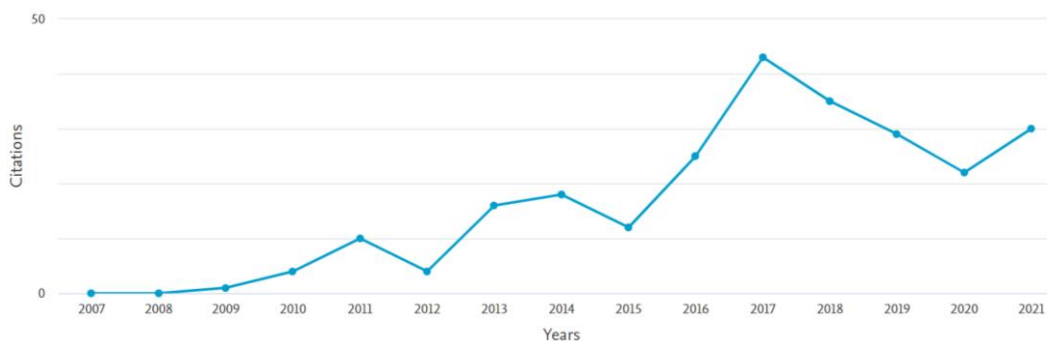
m-quotient = $11/13 = 0.85$**

Според J. E. Hirsh (PNAS November 15, 2005 102 (46) 16569-16572; <https://www.pnas.org/content/102/46/16569>):

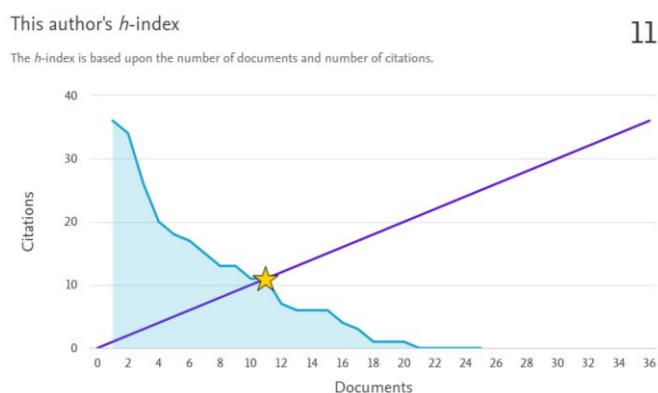
***Based on typical h and m values found, I suggest (with large error bars) that for faculty at major research universities, $h \approx 12$ might be a typical value for advancement to tenure (associate professor) and that $h \approx 18$ might be a typical value for advancement to full professor.”

***„A value of $m \approx 1$ (i.e., an h index of 20 after 20 years of scientific activity), characterizes a successful scientist.“

Конкурс за доцент в направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия), Д. В. брой 63 от 30.07.2021



Фигура 1. Брой цитати от базата данни Scopus по години за цялата изследователска кариера на кандидата д-р Юлия Романова (изключени са автоцитатите от всички автори).



Фигура 2. *h*-index графика от базата данни Scopus за кандидата д-р Юлия Романова.

Според Scopus в периода 2016–2020 кандидатът има приноси в следните тесни тематики: (1) Ruthenium; Tris(2,2'-Bipyridine)Ruthenium II; Excited States / (2) Magnetite Nanoparticles; Ferric Oxide; Contrast Media/ (3) Graphene Oxide; Photothermotherapy; Tissue Engineering/ (4) Platinum; Phosphorescence; Organic Light-emitting Diodes/ (5) Carbenes; Auranofin; (6) Heterocyclics/Singlet Fission; Naphthalenes; Pentacene. Тематика (2) и (3) са от научни публикации, които не са включени в конкурса. За тематики (4), (5) и (6) се наблюдава *topic field-weighted citation impact* (TFWCI) по-голям от единица, а за (1) близък до единица (**Таблица 1**). Периодът на извадката е фиксиран от базата данни и не включва статии на кандидата от периода 2010-2016, както и от настоящата 2021 година, с които тя участва в конкурса.

*Показателят TFWCI показва колко добре са цитирани документите по дадената тематика в сравнение с други документи по същата тематика от базата данни Scopus. Стойност по-голяма от 1,00 означава, че документите са по-цитирани от очакваното.

Таблица 1. Приноси на кандидата д-р Юлия Романова в периода 2016-2020 по тесни тематики и техният *topic field-weighted citation impact (TFWCI)*.

Topic	Author documents	Topic Field-Weighted Citation Impact [Ⓢ]
Ruthenium; Tris(2,2'-Bipyridine)Ruthenium II; Excited States	2	0.74
Magnetite Nanoparticles; Ferric Oxide; Contrast Media	1	1.15
Graphene Oxide; Phototherapy; Tissue Engineering	1	1.63
Platinum; Phosphorescence; Organic Light-emitting Diodes	1	1.11
Carbenes; Auranofin; Heterocyclics	1	1.27
Singlet Fission; Naphthalenes; Pentacene	1	1.63

II. НАУЧНИ ПРИНОСИ ОТ СТАТИИТЕ ВКЛЮЧЕНИ В КОНКУРСА

(номерацията на статиите съответства на списъка в 10B.SelectedPublicationsList.pdf)

В конкурса за доцент кандидатът участва с общо 15 публикации, от които 14 са в списания с IF и 1 е глава от книга. Публикациите обхващат периода 2010-2021 г., който включва 8 активни изследователски години и 2 години отпуск по майчинство.

Тринадесет от общо петнадесет научни труда включват изследвания на тема съвременни материали и са с приложна насоченост (Статии № 1-7 и 8-14), а два от тях са посветени на спектроскопски характеристики на молекулите (Статии № 10-11). Според системите, които изследват, публикациите на кандидата могат да бъдат разделени в две групи и са посветени на органични молекули с отворена електронна обвивка (Статии № 1, 2, 4, 8, 10, 11, 12, 13) или органометални комплекси (Статии № 3, 5, 6, 7, 9, 14 и 15). В 6 от представените изследвания кандидатът е първи автор с основен принос в провеждане на квантовохимичните изчисления, техния анализ и написване на статията, а в 5 е кореспондиращ автор с основен принос за идеологията, методологията и анализа на резултатите.

1. Научни приноси в областта на приложната изчислителна химия

1.1 Органични молекули с отворена електронна обвивка

- За първи път е изследвана връзката между дирадикалов характер и лабораторна стабилност при органични молекули. Зависимостите при изследваните дирадикалоиди са обяснени посредством класическата теория на Clar за ароматния секстет. (Статия №1)
- Доказано е, че комбинирането на квантовохимични индекси на реактивоспособност и хемометрични подходи може да служи за бързо и точно предсказване на лабораторната стабилност на органичните молекули. Това позволява разработката на компютърни модели, целящи откриването на нови атрактивни и в същото време стабилни материали за фотоволтаиката. (Статия №1)
- Демонстрирано е, че няма категоричен конфликт между стабилност и дирадикалов характер и че молекули с различен от нула дирадикалов характер (каквито са потенциалните високоефективни фотоактивни материали в соларните клетки) могат да бъдат и лабораторно стабилни. (Статия №1)
- Отдавайки дължимото признание на ключовите изследователки в областта е представен преглед на стратегиите за молекулен дизайн на хромофори за синглетно разцепване (Статия №2).
- Предложени са нови хромофори за синглетно разцепване и са изведени топологични правила за молекуления им дизайн. (Статия №4)
- За първи път са обяснени стабилността и оптичните свойства на бор-дотирани полициклични хромофори посредством: 1) теорията на Clar и 2) механизма на спин поляризация, което доказва, че те са мощни инструменти в стратегиите за молекулен дизайн. (Статия №4)
- Посредством CASSCF/CASPT2 изчисления е показано, че мономерите и димерните интермедиати при полимеризация на PPV по метода на Gilch притежават дирадикалов характер, чиито размер може да бъде свързан с кинетиката и добивът на странични продукти. (Статия №8).

- Показано е, че вариация в полярността на разтворителя може да доведе до значителни промени във V_{oc} (open-circuit voltage) при еднослойни фотоволтаични клетки, съдържащи емералдинова сол като фотоактивен компонент. (Статии №12)
- Обяснено е необичайното окислително-редукционно поведение на тънки порьозни филми от полианилин (Статия №13).

Статии:

1. THE INTERPLAY BETWEEN DIRADICAL CHARACTER AND STABILITY IN ORGANIC MOLECULES, Petakova, V., Nedyalkova, M., Stoycheva, J., Tadjer, A., Romanova, J., (2021) *Symmetry*, 13 (8), art. no. 1448
2. WOMEN IN THE SINGLET FISSION WORLD: PEARLS IN A SEMI-OPEN SHELL, Stoycheva, J., Romanova, J., Tadjer, A., (2021) *Molecules*, 26 (10), art. no. 2922
4. BORON-DOPED POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS: A MOLECULAR SET REVEALING THE INTERPLAY BETWEEN TOPOLOGY AND SINGLET FISSION PROPENSITY, Stoycheva, J., Tadjer, A., Garavelli, M., Spassova, M., Nenov, A., Romanova, J., (2020) *Journal of Physical Chemistry Letters*, 11 (4), pp. 1390-1396.
8. PPV POLYMERIZATION VIA THE GILCH ROUTE: DIRADICAL CHARACTER OF MONOMERS, Nikolic, J. D., Wouters, S., Romanova, J., Shimizu, A., Champagne, B., Junkers, T., Vanderzande, D., Van Neck, D., Waroquier, M., Van Speybroeck, V. (2015) *Chemistry – A European Journal*, 21, pp. 19176-19185.
12. THIN MESOPOROUS POLYANILINE FILMS MANIFESTING A WATER-PROMOTED PHOTOVOLTAIC EFFECT, Gospodinova, N., Tomšík, E., Romanova, J. (2013) *Chemical Papers*, 67 (8), pp. 972-978.
13. NEW INSIGHT INTO THE REDOX BEHAVIOR OF POLYANILINE, Gospodinova, N., Musat, V., Kolev, H., Romanova, J. (2011) *Synthetic Metals*, 161 (21-22), pp. 2510-2513.

1.2 Органометални комплекси

- Предложено е обяснение за цитотоксичността на комплекси на Au(I), като е показано, че тя зависи от σ -донорните свойства на изолираните лиганди. (Статия №3)
- Предложени са нови рН-чувствителни луминесцентни материали на база хетеролептични комплекси на Ru(II). Обяснена е ролята на лиганда за проява на луминесцентните свойства и възможността за модулацията им посредством рН. (Статия №5)
- Предложени са нови луминофори с възможност за излъчване в два различни енергетични диапазона на база хетеролептични комплекси на Ru(II). Възможността за двучестотно излъчване е обяснена посредством пространствено разделени и независимо съществуващи възбудени състояния от типа 3MLCT . Демонстрирана е стратегия за молекулен дизайн на Ru(II) базирани луминесцентни материали с възможност за излъчване в два различни енергетични диапазона, която се основава на разлика в LUMO нивата на изолираните лиганди. (Статия №6)
- За първи път е показано, че лигандното поле определя металофилното взаимодействие във възбудено състояние при комплекси на Pt(II) и ефектът е обяснен в рамките на метода на молекулните орбитали. Концентрационно и фазово зависимите луминесцентни свойства на Pt(II)-комплекси са обяснени посредством формирането на ексимери с доминиращо металофилно взаимодействие. (Статия № 7, 9)
- Демонстрирано е, че смяната на Pt(II) с Pd(II) в органометални комплекси възпрепятства междумолекулното взаимодействие във възбудено състояние, а наблюдението е обяснено с релативистични ефекти. (Статия №15)
- Показано е, че при едно- и дву-електронно окислените форми на Pt(II) комплекси се засилва металофилното взаимодействие в основно състояние. Илюстрирани са възможности за редокс зависима модулация в оптичните и проводящи свойства на комплексите в твърда фаза и концентриран разтвор. (Статия №15)

- Изведени са правила за молекулен дизайн на спин-хибридни молекулни магнити на база орбитално припокриване между метал и лиганд (Статия №14).

Статии:

3. ANTIPROLIFERATIVE ACTIVITY OF GOLD(I) N-HETEROCYCLIC CARBENE AND TRIPHENYLPHOSPHINE COMPLEXES WITH IBUPROFEN DERIVATIVES AS EFFECTIVE ENZYME INHIBITORS, Tabrizi, L., Romanova, J. (2020) Applied Organometallic Chemistry, 34 (5), art. no. e5618
5. MOLECULAR DESIGN OF PH-SENSITIVE RU(II)-POLYPYRIDYL LUMINOPHORES, Romanova, J., Sadik, Y., Ranga Prabhath, M.R., David Carey, J., Jarowski, P.D. (2019) Journal of Physical Chemistry A, 123 (23), pp. 4921-4928.
6. ENGINEERING TUNABLE SINGLE AND DUAL OPTICAL EMISSION FROM RU(II)-POLYPYRIDYL COMPLEXES THROUGH EXCITED STATE DESIGN, Romanova, J., Sadik, Y., Ranga Prabhath, M.R., Carey, J.D., Jarowski, P.D. (2017) Journal of Physical Chemistry C, 121 (4), pp. 2333-2343.
7. RELATIONSHIP BETWEEN METALLOPHILIC INTERACTIONS AND LUMINESCENT PROPERTIES IN PT(II) COMPLEXES: TD-DFT GUIDE FOR THE MOLECULAR DESIGN OF LIGHT-RESPONSIVE MATERIALS, Romanova, J., Ranga Prabhath, M.R., Jarowski, P.D. (2016) Journal of Physical Chemistry C, 120 (3), pp. 2002-2012.
9. THE ROLE OF SUBSTITUENT EFFECTS IN TUNING METALLOPHILIC INTERACTIONS AND EMISSION ENERGY OF BIS-4-(2-PYRIDYL)-1,2,3-TRIAZOLATOPLATINUM(II) COMPLEXES, Ranga Prabhath, M. R., Romanova, J., Curry, R. J., Silva, S. R. P., Jarowski, P. D. (2015) ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 54, pp. 7949-7953.
14. THEORETICAL STUDY ON THE STRUCTURAL ASPECTS OF CU(II) HYBRID-SPIN COMPLEXES, Miteva, T., Romanova, J., Ivanova, A., Tadjer, A., Baumgarten, M. (2010) European Journal of Inorganic Chemistry, 2010, pp. 379-390.
15. MOLECULAR DESIGN OF ORGANOMETALLIC MATERIALS: EFFECT OF THE METALLOPHILIC INTERACTIONS, LIGAND, METAL AND OXIDATION STATE,

Romanova, J., Ranga Prabhath, M. R., Sadik, Y., Jarowski, P. D. (2016) Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Progress in Theoretical Chemistry and Physics vol 30. A. Tadjer, A., Pavlov, R., Maruani, J., Brändas, E., Delgado-Barrio, G. (eds), Springer, Cham.

2. Научни приноси в областта на теоретичната спектроскопия

- Показано е, че електрон-вибрационното взаимодействие при дирадикалоиди зависи от дължината на π -електронното спрежение (Статия №11)
- Доказано е, че оценката на силата на електрон-вибрационното взаимодействие при катион-радикали е силно зависима от избора на параметър за корекция на обменните взаимодействия на голямо разстояние при TD-DFT методите, от вида на съединението и от типа на възбуденото състояние. (Статия №10).

Статии:

10. ANALYSIS OF THE RESONANT RAMAN SPECTRA OF VIOLOGENS AND OF THEIR RADICAL CATIONS USING RANGE-SEPARATED HYBRID DENSITY FUNCTIONALS, Romanova, J., Liégeois, V., Champagne, B. (2014) Journal of Physical Chemistry C, 118 (23), pp. 12469-12484.
11. RESONANT RAMAN SPECTRA OF MOLECULES WITH DIRADICAL CHARACTER: MULTICONFIGURATIONAL WAVEFUNCTION INVESTIGATION OF NEUTRAL VIOLOGENS, Romanova, J., Liégeois, V., Champagne, B. (2014) Physical Chemistry Chemical Physics, 16 (39), pp. 21721-21731.