

СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Ивелина Мирчева Георгиева

Институт по обща и неорганична химия, БАН

на материалите за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“

в Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН

в област на висше образование 4. Природни науки, математика информатика

професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия“

за нуждите на лаборатория „Органичен синтез и стереохимия“ (ОСС)

В конкурса за ‘доцент’, обявен в Държавен вестник, бр. 9 от 30.01.2024 г. и на интернет-страницата на ИОХЦФ-БАН, участва един кандидат: гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева; Vera Deneva; ORCID: 0000-0002-1285-9037; Scopus ID: Deneva, 35078441400

Общо представяне на процедурата и кандидата. Представеният комплект материали (на хартиен и електронен носител) за участие в конкурса е в съответствие с изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за неговото прилагане в БАН и препоръчителните критерии на ИОХЦФ-БАН по ПН 4.2. Химически науки. Справката на посочените изисквания при заемане на АД „доцент“ показва, че Вера Денева изпълнява необходимия минимум по всички групи показатели (А, В, Г, Д, (Е), Ж) и събира **860 т.** при общ изискван минимум 445 т.

Вера Денева завършва висшето си образование във ФХФ при СУ с магистърска степен по Органична химия през 2009 г., а през 2013 г. в ИОХЦФ, тя придобива образователната и научна степен „доктор“ по ПН 4.2 Химически науки, НС „Органична химия“. С наличие на докторска степен, кандидатката изпълнява показател „А“ (**50 т.**). Като млад учен, през 2012 г. Денева е удостоена с наградата на БАН „Иван Евстратиев Гешов“ за научно постижение на тема „Нови молекулни превключватели и сензорни системи на базата на тавтомерен пренос на протон“. В последователното си кариерно развитие в областта на Органичната химия, като асистент (2012-2017 г.) и главен асистент от 2017 г. в Лаборатория „Органичен синтез и стереохимия“ при ИОХЦФ, д-р Денева има натрупан над 10 години трудов стаж по специалността. По време на научната си кариера кандидатката е провела една 8-месечна специализация в Швейцария.

Научно-изследователска дейност. В досегашната си научно-изследователска дейност, д-р Денева е съавтор в **26 научни статии** (по приложен списък) и 28 по база данни на SCOPUS, като всички те са публикувани в индексирани списания на базата данни SCOPUS и Web of Science. Към момента на оформяне на документа, общият брой **цитирания** на публикациите е **391**, **Н-индекс 10** (SCOPUS) (без автоцитирания на всички съавтори), който надхвърля изисквания Н-индекс 5.

В настоящия конкурс, д-р Денева участва с **16 оригинални научни публикации**, които изключват тези от докторския ѝ труд. Статиите съответстват тематично на конкурса по НС „Органична химия“ и са публикувани в престижни реферирани списания като *Dyes and Pigments* (IF = 4.9), *Journal of Molecular Liquids* (IF = 6.6), *Physical Chemistry Chemical Physics* (IF = 3.7), *Spectrochimica Acta Part A* (IF = 3.2), *Molecules* (IF = 4.6) и др., което е признание за значимостта на научните изследвания с участието на д-р Денева. Впечатляващи са наукометричните показатели на кандидатката: всички статии за участие в конкурса са публикувани във високо индексирани научни издания и разпределени по

квартили (за годината на публикуване), те са както следват: **14** в **Q1** и **2** в **Q2**. С публикационната си активност, д-р Денева изпълнява минималните критерии: 1) по ГП „В“ за хабилитационен труд върху 6 научни статии с Q1 (изисквани 100 т./изпълнени **150** т.); по ГП „Г“ за научни трудове и патенти (изисквани 220 т./изпълнени **240** т.); 3) по ГП "Д" за 118 цитирания в SCOPUS на включените публикации в конкурса (без автоцитирания на съавтори) (изисквани 70 т./ изпълнени **236** т.). В 6 от научните статии по конкурса, д-р Денева е първи автор.

В изпълнение на изискванията по конкурса за АД „доцент“, д-р Денева е представила **хабилитационен труд** на тема *„Тавтомерни изследвания на органични съединения: Спектрални свойства, структурни модификации и потенциални приложения“*. В тази справка по преценка на кандидатката са включени 16-те публикации по конкурса. Нейният научен интерес и компетентност са в разработване на материали на основата на тавтомерни системи с оптични приложения като молекулни превключватели и сензори. Основен принос на д-р Денева е уелото прилагане на молекулна спектроскопия (абсорбционната и флуоресцентна в UV-Vis областта) за изучаване на тавтомерните свойства на органичните съединения, факторите, които активират тяхното превключване и механизмите на тавтомерно превръщане. По-важните резултати от научно-изследователската работа могат да се обобщят, както следва:

1) Изучено е тавтомерното поведение на серия азоафтолни багрила в основно състояние:

Оценена е ролята на разтворителя и заместителите при нафтола за контролиране на кето-енолното равновесие при арил азо нафтолните производни. Установени са подходящите лиганди, които селективно комплексообразуват с алкални и алкалоземни йони, предизвикват батохромно отместване на абсорбционната ивица и са потенциални оптични сензори за откриване на метални йони.

Изучени са две серии азобагрила в разтвор и твърдо състояние, които се стабилизират съответно в азо енол и хидразо тавтомерни форми. Двете групи имат потенциал да се използват като референтни съединения за установяване на азо или хидразо тавтомерия с ЯМР спектроскопията.

Изучен е процесът на Z/E изомеризация на етил-2-(2-(хинолин-8-ил)хидразоно)-2-(пиридин-2-ил)ацетат и е предсказан най-вероятният механизъм на превключване чрез протонен пренос посредством молекули вода, образуващи верига.

Изследвани са тавтомерните равновесия при два нови 4-хидроксикумарин азо (нафтилов или хинолинов) багрила в основно и възбудено състояние при различни разтворители. Установено е, че те съществуват като кето (хидразонови) тавтомери, които не се повлияват от полярността на разтворителя. Показано е, че протонирането е подходящ стимул за E/Z превключване и е предложен възможен механизъм на процеса.

2) Изследвано е тавтомерното поведение на три групи Шифови бази: 4-заместени фталимидни 2-хидроксилни, 7-хидрокси хинолинови и бензотиазо пиколин/изоникотинамидни бази. С комбиниране на експериментални методи на UV-Vis спектроскопия, кристалография и флуоресцентна спектроскопия е оценено влиянието на типа разтворител, възможните ротации, протонирането и др. върху тавтомерното равновесие на Шифовите бази. С изясняване на фотофизиката и динамиката на протонния пренос при молекулните превключватели са разкрити потенциалните им приложения като оптоелектронни устройства.

3) Изучено е тавтомерното поведение на серия производни съединения на 10-хидроксibenзо[h]хинолин (НВQ) и 1,3,5-триазин в основно и възбудено състояние. С молекулна спектроскопия е оценено влиянието на разтворителя и типа заместители в скелета върху тавтомерното равновесие и механизма на пренос на протон (едно- и дву-степенен).

4) Предсказано е необичайно анти-Каша поведение при роторен превключвател, включващ пиридилов пръстен и карбоксилна група като подвижни заместители на базата на експериментални спектроскопски данни от UV-Vis, екситационни и флуоресцентни спектри, флуоресцентен квантов добив, време на живот на флуоресцентното излъчване.

5) Интерес представлява изследването за първи път на кето-енолната тавтомерия на биоактивното съединение, фавипиравир в разтвор. С молекулна спектроскопия е установено, че кето тавтомерът се стабилизира във вода, докато енолният тавтомер е предпочетен в органични разтворители. Предсказана е възможността депротонираната форма на лиганда да образува комплекси с алкалоземни йони (Mg^{2+} , Ca^{2+}).

б) Методични изследвания:

Разработване на калибрационни модели, използващи абсорбционни спектроскопия в близката инфрачервена област за количествено определяне на съдържанието на активни компоненти в проби от *Arnicae flos* вещество, получено от растенията *Arnica montana L.* и *Arnica chamissonis Less.*

Разработване на калибрационни модели за измерване на фенолни съединения във виното с помощта на Раманова спектроскопия, която е бърза, недеструктивна аналитична техника. С оценката на химичния състав се цели да се класифицират българските вина.

Научната дейност на д-р Денева е тясно обвързана с изпълнението на 13 проекта: два международни (научни мрежи по надмолекулна химия suprschem@balkans.eu suprsmedchem@balkans.net, финансирани от швейцарската научна фондация), 11 към ФНИ-МОН и на един проект за млади учени, тя е ръководител. За разпространение на научните резултати, д-р Денева е участвала в 13 научни форума, 10 международни и 3 национални, с представяне на 2 доклада и 11 постерни съобщения.

Коментар: В публикациите за конкурса, д-р Денева е съавтор в 6-7 членен колектив и изследванията са мултидисциплинарни. Би било по-ясно, кандидатката в конкурса изрично да заяви личния си принос и компетентност в съвместните изследвания.

В заключение, високата оценка на изследванията с участието на д-р Денева, публикувани в престижни специализирани списания, научните й приноси и активното й участие в проекти доказват, че тя е висококвалифициран и утвърдил се учен в областта на тавтомерните органични системи и молекулната спектроскопия за тяхното изследване, в пълно съответствие с научната специалност “Органична химия“ на конкурса за „доцент“. Представеният анализ на материалите по конкурса ми дават основание убедено да гласувам **положително с „да“** и препоръчвам на Научното жури да предложи на Научния съвет на ИОХЦФ при БАН, **главен асистент д-р Вера Венциславова Денева да бъде избрана на академичната длъжност „доцент“ в ИОХЦФ-БАН** по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия“.

23.05.2024 г.

Изготвил становището:

проф. д-р Ивелина Георгиева