

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Тодор Минков Дудев
Софийски университет „Св. Климент Охридски“

на материалите, представени за участие в конкурс
за заемане на академичната длъжност ‘доцент’
в **Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН**
по област на висше образование
„Химически науки“, професионално направление 4.2 „Органична химия“

В конкурса за Доцент, обявен в Държавен вестник, бр. 9 от 9/30.01.2024 г. и в интернет-страница на ИОХЦФ - БАН, като кандидат участва гл. ас. д-р **Вера Венциславова Денева** от ИОХЦФ – БАН.

1.Общо представяне на получените материали

За участие в обявения конкурс е подал документи единствен кандидат гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева, ИОХЦФ – БАН. Представеният от гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева комплект материали е в съответствие с Правилника за развитие на академичния състав на ИОХЦФ, и отговаря на критериите на ИОХЦФ-БАН за заемане на академичната длъжност „доцент“.

Кандидатът гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева е приложил общо **26** научни труда. Приемат се за рецензиране **16** научни труда, които са извън докторската дисертация, и се отчитат при крайната оценка и **11** научноизследователски проекти. Не се рецензират **5** научни труда по дисертацията и **5** научни труда извън проблематиката на конкурса. Разпределението на определените за рецензиране научни трудове по съответните Q фактори е както следва: **Q1 – 12 публикации и Q2 – 4 публикации.**

2. Кратки биографични данни на кандидата

Вера Денева завършва висшето си образование (бакалавър) в Химическия факултет на СУ „Св. Климент Охридски“ през 2007 година, а през 2009 година, в същия факултет, получава магистърска степен по Органична химия. През 2009 година постъпва като редовен докторант в Института по органична химия с център по фитохимия - БАН, където през 2013 година, под ръководството на проф. Людмил Антонов, успешно защитава докторска дисертация на тема „Експериментални и теоретични изследвания на тавтомерни системи на основата на азо-нафтоли и техни азометинови аналози“. През 2012 година е назначена за асистент в ИОХЦФ-БАН, а през 2017 година, в същия институт, израства до главен асистент. През целия период на кариерно развитие д-р Денева е публикувала 26 научни труда в реферирани високоимпактни (предимно в квартал Q1) списания в областта на тавтомерни превръщания в системи, подходящи за използване като молекулни превключватели и сензори. Резултатите от нейните научни изследвания са докладвани на 13 национални и международни научни конференции. Специализирала е в Universite de Fribourg, Швейцария (10.2011 – 06.2012). Носител е на наградата на БАН „И.Е. Гешов“ за най-млад учен до 30 години (2011 г.). Била е участник или ръководител в, съответно 9 и 1, успешно завършени национални научни проекта към Фонд научни изследвания, както и участник в две научни мрежи по надмолекулна химия (Suprachem@Balkans.eu и SupraMedChem@Balkans.Net) финансирани от Швейцарската национална научна фондация.

3.Обща характеристика на дейността на кандидата

Оценка на научната и научно-приложна дейност на кандидата

За конкурса д-р Денева е представила 16 публикации, всичките отпечатани в международни реферирани списания, и групирани в група показатели В (6 публикации) и Г (10 публикации). Всичките статии са публикувани между 2017 и 2023 година и не се припокриват с трудовете, използвани за придобиване на образователната и научна степен “Доктор” (2013 година). От всичките 16 публикации, 12 попадат в квартал Q1, а останалите 4 са в квартал Q2. Импакт факторите на списанията, където трудовете са отпечатани, варират между 1.7 и 6.6, като преобладават тези със стойности 3.3 - 4.6. С изключение на една статия (No 6 от група Г; двама съавтори) всички статии са дело на голям колектив от

съавтори (между 6 и 10). Д-р Денева е първи автор в 6 от публикациите, втори автор в 5 от тях, трети в 2 публикации, четвърти в 2 работи и пети в 1 статия. По-голямата част от публикациите (11) са в съавторство с учени от чужбина. Включените в конкурса статии са цитирани 118 пъти в литературата от независими източници. Резултатите от изследванията на кандидата са представени, след 2013 година, с постери (7) и устни доклади (2) на 5 национални и 4 международни конференции.

Приноси (научни, научно-приложни, приложни)

Научните приноси на д-р Денева са насочени към изучаване и охарактеризиране на тавтомерни превръщания в редица класове от органични молекули, както и определяне на ключовите фактори, влияещи на тавтомерното равновесие в тези системи. По-конкретно, изследванията на кандидата са фокусирани върху следните класове органични молекули:

Азобагрила (статии 1 и 5 от показател В и 1, 4, 5 и 6 от показател Г)

Чрез комбинирано използване на УВ/ВИС и ЯМР спектроскопия, квантово-химични изчисления и кристалографски анализ е разкрит ефектът върху поведението на тавтомерния протон при структурни модификации в азнафтолни багрила, както и при комплексообразуване с алкалоземни катиони. Оценена е ролята на тавтомерията като основен превключващ механизъм при селективното комплексообразуване с лиганда 4-(фенилдиазенил) нафтален-1-ол като тавтомерен фрагмент и amidна група в ролята на антена за свързване с метални катиони. Въз основа на проведените изследвания е разработена система, при която комплексообразуването с метални катиони отстранява напълно тавтомерното равновесие към кето-тавтомера и повишава значително стабилността на образувания комплекс. Предложен е теоретичен дизайн на тавтомерни оптични сензори, на базата на същия лиганд, за откриване на алкалоземни катиони. В публикация 5 от група В са анализирани, с помощта на молекулна спектроскопия и квантово-химични изчисления, два нови ротационни превключвателя на базата на 4-ОН кумарин, съдържащи фиксирани карбонилни групи в ротора. Показано е, че протонирането е движеща сила за E/Z превключване, вследствие на което е предложен и възможният механизъм на процеса. Публикация 1 от група В разкрива ключовата роля на водата и убедително предлага нов (подкрепен както от теоретични така и от експериментални данни) механизъм на тавтомеризация на етил-2-(2-(хинолин-8-ил)хидразоно)-2-(пиридин-2-ил)ацетат: преносът на протон от Z- към E-формата на превключвателя се осъществява

от вериги/жици от водни молекули, което е съпроводено от значително понижение на активиращата енергия на тавтомерното превръщане.

Шифови бази (статии 2, 3 и 6 от показател В)

Изследвано е тавтомерното равновесие (с помощта на УВ-ВИС и флуоресцентна спектроскопия, кристалографски анализ и квантовохимични изчисления) при две 4-заместени фталимидни 2-хидроксилни шифови бази с различни 2-хидроксиарилови части. Тавтомерия се наблюдава при съединението с нафтилова част (зависещо от разтворителя) докато при фениловия аналог, такава не е отчетена. Публикация 3(В) хвърля светлина върху тавтомеризацията при две новосинтезирани шифови бази, получени от 7-хидроксихинолин. При облъчване и при двете съединения се наблюдава въртене около специфична връзка, в резултат на вътрешномолекулен пренос на протон във възбудено състояние, което ги прави подходящи кандидати за използване като двустабилни превключватели. Процесът на вътрешномолекулярна ротация спира при протониране на системата. Комбинираното използване на спектрални и квантово-химични методи разкрива механизма на тавтомерно превръщане в други два молекулни превключвателя - N-(бензо[d]тиазол-2-ил) пиколинамид и N-(бензо[d]тиазол-2-ил) изоникотинамид. Получените резултати изясняват фотофизиката и динамиката на протонния пренос на тези системи, което разкрива потенциалните им приложения като оптоелектронни устройства.

Тавтомерни равновесия в други органични системи (публикации 4 от показател В и 1, 8, 9, 10 от показател Г)

В серия от публикации е проведен задълбочен анализ на тавтомерните процеси в 10-хидроксибензо[h]хинолин и негови структурно модифицирани съединения (публикация 1(Г)), роторен превключвател, синтезиран с пиридилов пръстен и карбоксилна група като подвижни заместители (статия 4(В)), производни на пинен-бипиридина и пинен-фенантролина (статия 8(Г)), фавипиравир (статия 9(Г)) и група съединения с 1,3,5-триазиново ядро (статия 10(Г)). Изяснен е механизмът на пренос на протон в тези системи. Определени са ключовите фактори, влияещи на тавтомерното равновесие.

Други тематика (публикации 3 и 7 от показател Г).

Публикации 3(Г) и 7(Г) са посветени на използването на близката инфрачервена и Раманова спектроскопия за количествено определяне на активни компоненти от фармакологичен интерес в природни продукти, както и качеството на български вина.

Статиите предлагат надеждни и иновативни подходи за извършване на съответните анализи.

4. Оценка на личния принос на кандидата

Д-р Денева има значителен принос и се явява движеща сила при разработването и оформянето на преобладаващата част от публикациите, включени в конкурса. Показателен е фактът, че, в статиите, където участва голям брой съавтори, тя е първи автор в 6 и втори автор в 5 от тях.

5. Критични забележки и препоръки

Убедително са изведени зависимости относно поведението на тавтомерите на изследваните системи в различни среди и химично обкръжение. Доколко резултатите от проведените изследвания са приложими в практиката и правени ли са постъпки за патентоване на получените резултати?

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените от кандидата публикации и реабилитационен труд са по темата на конкурса и представляват оригинални научни разработки със значителен принос в областта на тавтомерните превръщания в органични системи и молекулни ротори и превключватели. Приложените материали ми дават основание убедено да смятам, че кандидатът е утвърден учен в своята област с дълбоки познания и практически умения в областта на молекулната спектроскопия и теоретичната химия. Демонстрира отлично владение на набор от експериментални и изчислителни подходи, което му позволява да изследва на високо научно ниво (state-of-the-art) сложни молекулни системи с нетривиално поведение и физико-химични характеристики. Получените резултати носят иновативен характер (доказателство са серията публикации във високоимпактни списания) и могат да се причислят към категорията новости в научното дирене. Кандидатът демонстрира зрялост, творческо мислене и умение да подбира и решава успешно задачи с висок импакт за науката и практиката.

В заключение, в резултат на гореизложеното, считам убедено, че със своята научно-изследователска дейност гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева напълно отговаря на всички

изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност „Доцент“. Предлагам гл. ас. д-р **Вера Венциславова Денева** да бъде избрана за Доцент по професионално направление 4.2 Химически науки (Органична химия) в Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХЦФ), БАН.

21.05.2024 г.

Рецензент:



(проф. дхн Тодор Дудев)