

Р е ц е н з и я

по конкурс за **доцент** обявен в ДВ бр.48 от 31.05.2013 г. в професионално направление

4.2. Химически науки (Теоретична химия)

за нуждите на Лаборатория ФОИХ при ИОХЦФ-БАН

с единствен кандидат **Милена Иванова Спасова**, д-р, главен асистент

Рецензент: професор д-р **Аля Витали Таджер**,

Факултет по химия и фармация, СУ “Св. Климент Охридски”

Кратка биографична справка за кандидата: д-р Спасова е възпитаник на Физическия факултет на СУ “Св. Климент Охридски”, където през 1992 г. се дипломира като магистър в специалността “Физика на твърдото тяло”. Трудовият и стаж протича в ИОХЦФ-БАН: през 1994 г. е назначена като химик, в 1995 г. става н.с. III ст., в 1999 г. - н.с. II ст., в 2005 г. - н.с. I ст. Защитава дисертация и придобива ОНС ‘доктор’ през 2003 г. Научен ръководител е ст. н.с. I ст. дн Иво Кънев. Пост-докторантска специализация осъществява през 2004-05 в Университета Notre Dame de la Paix, Намюр, Белгия в групата на проф. Venoit Champagne, с когото поддържа научно сътрудничество и до момента.

Анализ на представените материали по конкурса

Научни статии

За участие в конкурса, д-р Спасова представя общо 21 научни публикации. От тях 18 са в реферирани издания (ICI, Scopus). Публикациите след придобиване на ОНС ‘доктор’ са 16, от които 15 са в реномирани списания с импакт фактор. Всички статии са на английски език.

Статиите са в списания като *Journal of Molecular Structure* (1); *Bulg. Chem. Commun.* (2), *C. R. Acad. Bulg. Sci.* (1), *J. Mol. Struct. (Theochem)*, *J. Chem. Phys.* (2), *Chem. Phys.*, *Phys.Chem.Chem.Phys.*, *Int. J. Quant. Chem.*, *Chem. Phys. Lett.* (6), *J. Phys. Chem. C* (2), *Chem. Phys. Chem.*, *Computational and Theoretical Chemistry* и др.

Д-р Спасова е първи автор в 6 от тези 21 статии. Прави впечатление, че авторските колективи, в които участва кандидатът, имат сравнително постоянен, често многолюден състав.

Забелязаните 262 цитата са върху общо 15 от публикациите, което показва, че повечето от научните съобщения на д-р Спасова са привлекли значително читателско внимание. Средната цитируемост е около 12.5 – много висока за кандидат в конкурс за доцент. Най-цитирана е публикация No 6, залегнала в докторската ѝ дисертация (62 цит.), следвана от No 15 (32 цит.). h-факторът на кандидата е с респектиращата стойност 10, с каквато не могат да се похвалят дори мнозина от кандидатите за академичната длъжност ‘професор’ у нас.

Участия в национални и международни конференции с доклади и постерни съобщения

Резултати от научните изследвания на кандидата са били представени в постерни доклади на 2 национални и 7 международни конференции и като устни съобщения на 2 национални и 1 международен научен форум. Изнесени са и 4 доклада от д-р Спасова пред университетска аудитория в Белгия. Намирам че има какво да се желае от популяризаторската дейност на кандидата и препоръчвам по-голяма активност в тази насока.

Научни направления

Може да се каже, че всички изследвания на д-р Спасова са в областта на теоретичното квантово-химично охарактеризиране на геометричната и електронна структура и свойства на органични молекули и олигомери. Обектите са предимно системи с π -спрежение: полиени с акцент върху полиацетилен, различни циклични и полициклични структури и техни производни. От свойствата най-много внимание е отделено на електрооптичните свойства, в изследването на които кандидатът е истински експерт, както и на описание на някои спектрални характеристики и на склонността към участие в процеси с пренос на заряд или миграция на протони. За целта са използвани първоначално полуемпирични квантовохимични методи от най-висок клас и най-вече *ab initio* методи, основани предимно на пост-Хартри-Фок схеми, с използване на богат набор от атомни орбитални базиси. Използвана е широко теорията на пертурбациите и теорията на функционала на плътността. Разработени и кодирани са оригинални модули към съществуващи популярни програмни пакети.

Бих разделила представените материали най-общо на 3 групи.

Първата и, бих казала, водещата е посветена на пресмятане на нелинейните оптични свойства на спрегнати системи. Тази тема е в основата на дисертацията за придобиване на ОНС 'доктор', но интересът на кандидата към нея е постоянен – с нея са свързани тематично 14 от представените 21 публикации [2-7, 9, 11, 12, 14-17, 19]. Повечето от тях са изцяло теоретични, но има и такива, съчетани със експериментални изследвания (синтез, спектрални измервания) на авторския колектив [9, 15, 19]. Сред тях има разработки с методичен [2, 17], както и с приложен характер. Във всички случаи изследванията на конкретни системи следват стандартен протокол на геометрична оптимизация, последвана от пресмятане на нелинейните оптични свойства по оригинална или стандартна схема. Част от резултатите целят да обяснят наблюдавани явления, но повечето имат предсказателен характер.

Втора тематика е свързана със структурното характеризирание на проводящи полимери, в частност полиацетилен [6, 8, 10, 11, 16], с отчитане на влиянието на допантите като количество и пространствена позиция, оценка на разпределението на заряда и на размера на солитонния дефект, формиран от допанта. Както личи от цитатите, тези разработки са послужили като ръководно начало за изследвания, посветени на сродни и различни по строеж и характер на токоносителите органични проводници.

Трета група от статии прави оценка на спектрални характеристики – UV, IR, NMR, CD и др. на органични системи [9, 13, 18, 19-21]. Обекти са спирохидантоини, хлороалкани, хелицени, аминокбензимидазоли, перилени и др. Сред тях се откроява и подгрупа от системи [18, 20, 21], в които е възможно тавтомерно равновесие и неговото насочване с помощта на електрично поле, което отваря перспективи за употребата им в електронни устройства.

Остава неклассифицирана публикация No 1, базирана на химична комбинаторика за генериране кодиране и визуализация на структури, към което кандидатът не е проявил по-нататъшен интерес.

Наличието на видимо добре дефинирана научна тематика е важен признак за академично израстване. По моя преценка кандидатът има безспорна и ясно очертана научна тематика, в която систематично разширява и разнообразява както методите, така и обектите на изследванията си. Това мое мнение се затвърждава от раздела в авторската справка за научни приноси, посветен на предстоящата изследователска работа на кандидата.

Научни приноси

Научните приноси са обобщени от кандидата в Справка за научните приноси която отразява адекватно съдържанието и приносния характер на представените изследвания.

Най-същественният принос в публикациите на кандидата е свързан с разработка и приложение на методи за оценка на линейната и нелинейните поляризуемости. Пресмятането на последните е най-често в приближението SOS/CI базиран на TDHF. Предложен е формализъм за бърза оценка на тези величини. SOS/CI е приложен в полуемпирични и *ab initio* квантовохимични методи и кодиран в програмата $\alpha\beta$ -SOS-code. Подходът има предимства в пресмятане на коефициенти, зависещи от честотата, и във възможността за оценка на приноси от различните възбудени състояния при използване на 'анализ чрез отсъствие на състояние', като резултатите получени с него не отстъпват на тези от други методи отчитащи електронната корелация. Методът е тестван върху малки молекули, показвайки необходимостта от включване на голям набор от възбудени състояния, върху типични донор-акцепторни системи - полиенова верига и изомери на нитроанилина, както върху конформерите на квадратната киселина и някои петчленни хетероцикли. Демонстрирана е ролята на геометрията, конформацията, разпределението на заряда, присъствието, количеството и вида на противойоните, окисление, (де)протонирането, брой и позиция на заместителите, отчитане на разтворител и др. за стойностите на нелинейните оптични характеристики. Разработен е метод за оценка на вибрационната хиперполяризуемост чрез комбиниране на пертурбационната теория и метода на крайното поле за хармонични и анхармонични приноси и е демонстриран значителният дял на последните при Кер-ефекта в дотирани олигомери, докато първите са важни при DFWM (Degenerate Four-Wave Mixing) и dc-SHG (direct current Second Harmonic Generation). Специално внимание е отделено на нелинейните оптични свойства на хирални съединения и е сравнена ролята на природата на спиралната верига с тази на заместителите.

Като втори съществен принос бих изтъкнала изследването на структурните дефекти в неутрални и дотирани олигомери на проводящи полимери. С помощта на профила на алтернацията в дължините на връзките е определен размерът на солитонния дефект и как той се повлиява геометрично и зарядово от присъствие и вид на противойони. Тествана е и надеждността на методи от различни нива, чиито резултати конвергират при явно отчитане на противойон. Методологичен принос в тази връзка е и дефинирането на понятието заряд на солитон и определянето на неговата корелационна чувствителност.

Трети принос може да се извлече от разнообразните симулации на спектрални характеристики на различни класове от съединения: хелицени, перилени, (хлор)алкани. От една страна тези изследвания дават рецепта за теоретично описание на експериментално измерени величини, от друга – имат прогностичен характер. Най-впечатляващ резултат е този от пресмятането на ЯМР химичните отмествания на алкани и техните хлорни производни, където е

показана ролята на отчитането на корелационни и релативистични ефекти за вярна интерпретация на спектрите и са предложени линейни корелационни зависимости между теория и експеримент, отчитащи в неявен вид всички ограничения на теоретичните модели.

Като четвърти и последен принос може да се посочат новите моменти в изследването на системи с подвижен/мигриращ водород – системи с тавтомерни форми и/или водородни връзки. Показано е, че правилната интерпретация на механизма на протонен пренос изисква изследване на възможността за димеризация или участие на възбудени състояния, както и че тавтомерното равновесие може да се манипулира и насочва чрез външни фактори за желани приложения.

Според мен съществен самостоятелен принос на представените публикации е и внимателният и аргументиран избор на изчислителен протокол по отношение на подбор на метод и базис и валидацията му спрямо експериментални данни и ‘точни’ изчислителни стандарти.

Участия в проектна дейност

Милена Спасова е участник в 4 проекта финансирани от НФНИ, както и в 8 проекта в рамките на прякото споразумение между ИОХЦФ-БАН и Университета Notre Dame de la Paix, Намюр, Белгия. Смятам, че и в тази насока кандидатът трябва да прояви по-голяма активност – като бъдещ ръководител на проекти. Тематиката на проектите е пряко свързана с научните интереси на кандидатката и очертаните по-горе научни направления на изследванията ѝ и реализацията им във всички случаи изисква интердисциплинарен подход. Обект на изследване в договорите са разнообразни класове от съединения, представляващи интерес предимно за съвременното материалознание насочено към търсене на вещества с неконвенционални свойства за модерните технологии.

Лични впечатления

През последните няколко години д-р Спасова участва с една лекция в курса „Компютърни методи в спектроскопията” на магистърска програма *Изчислителна химия* във ФХФ-СУ. Наред с това редовно е канена като отлично подготвен специалист на обсъждания, апробации и защиты на дисертации и дипломни работи. Мнението ѝ, както и нейните съвети и/или предложения, винаги са били особено ценни за дисертантите. Това напълно съвпада и с моето отношение към кандидата. Намирам, че Милена Спасова може да бъде отличен и полезен преподавател и ако не я обезкуражават ниските хонорари в държавните университети, бих препоръчала да

подготви по-значителен модул към съществуващ курс или да предложи самостоятелен избран курс, в което охотно бих я подкрепила.

Заклучение

В конкурса гл. ас. д-р Милена Спасова се представя с необходимия брой публикации и изследванията ѝ са в област значима за науката и практиката. Научните ѝ резултати са оригинални и намират значителен отзвук в специализираната литература. **Оценките направени по-горе за научната ѝ продукция ми дават основание с пълна увереност да предложа на уважаемото Научно жури да подкрепи избора ѝ за ДОЦЕНТ в направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).**

И нека да ѝ пожелаем ново самочувствие и нови успехи!

06.10.2013 г.

Рецензент:

/А. Гаджер/