

## С Т А Н О В И Щ Е

**от доц. д-р Васил Борисов Делчев (кат. Физикохимия на ПУ)  
на материалите, представени за участие в конкурс  
за заемане на академичната длъжност "доцент"  
на Института по Органична химия с ЦФ, БАН - гр. София  
по област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика,  
професионално направление 4.2. Химически науки,  
научна специалност: "Теоретична химия"**

Със заповед РД-09-106/02.08.2013 на Директора на ИОХ с ЦФ (БАН) съм избран за член на НЖ по конкурс за "доцент", обявен в Държавен вестник, бр. 48 от 31.05.2013 г. и на интернет-страницата на ИОХ за нуждите на лабораторията ФОИХ. На първото му заседание, проведено на 9.08.2013 г. съм определен да изготвя становище. В конкурса за "доцент" участва един кандидат: гл. ас. д-р Милена Иванова Спасова от същата организация. Не познавам кандидатката до настоящата процедура!!!

Милена Спасова завършва специалност Физика *cum laude* във Физическия факултет на СУ "Св. Климент Охридски" и специализира Физика на твърдото тяло. През 1994г. е назначена на позиция "химик" в ИОХ с ЦФ, лаборатория по ЯМР. На следващата година, след конкурс, заема длъжността "научен сътрудник" в същия институт. През интервали от 3-5 години достига до най-високата степен на това звание (съгласно отменения ЗНСЗ). През 2003г. кандидатката защитава успешно дисертация за придобиване на ОНС "доктор" по научната специалност "Теоретична химия". Владее много добре английски и френски език (видно от публикациите и контактите ѝ с международни изследователски екипи), ползва руски език. Доктор Спасова е реализирала една следдокторска специализация в Белгия в университета *Notre Dame de la Paix*, Намюр, което и помага за изграждането ѝ като учен на световно ниво.

Представеният от д-р Спасова комплект материали на дигитален носител е в съответствие с Правилника за развитие на академичния състав на ИОХ. Кандидатката е представила общо 21 научни публикации, от които 16 в международни специализирани списания. Прави впечатление прогреса на публикациите: наблюдава се публикационна активност в списания с все по-висок импакт фактор. В този хронологичен ред нараства също броят на съавторите на д-р Спасова, т.е. разширява се сътрудничеството ѝ с други екипи и учени в областта на изчислителната химия. Кандидатката е установила контакти с международни учени (*Benoit Champagne*) и успешно е публикувала съвместни теоретични изследвания върху разнородни по строеж органични обекти. От представения списък с публикации и справка на приносите не става ясно обаче какъв е личният принос на кандидатката в публикуваните изследвания. В голям брой публикации тя е последен автор, което съгласно "западните стандарти" показва, че д-р Спасова е ръководител на екип - положителна стъпка към нейната хабилитация

(ако това е значението на позициите на авторите). Липсват данни затова, каква част от публикациите са участвали в други процедури, за заемане на академични длъжности.

Доктор Спасова е представила списък с над 250 броя цитирания на публикациите, което говори за широкото международно признание на нейните изследвания. Би било добре кандидатката да посочи също импакт факторите на списанията с нейните публикации.

Кандидатката е изнесла три доклада в университета *Notre Dame de la Paix*, Намюр и един доклад в Свободния университет в Брюксел - Белгия. Изнесени са още два доклада на национални научни форуми и един на международна конференция в Гърция. Доктор Спасова има девет постерни участия на научни форуми. Налична е и рецензентска дейност в специализирани издания. Всички тези научни изяви са напълно достатъчни за заемане на академичната длъжност "доцент" на ИОХ с ЦФ.

Кандидатката участва (като член на колектив) в четири научни проекта, финансирани от български източници и 8 научни проекта, изпълнявани по линията на прякото споразумение на БАН с Френската общност и Регион Валония, Кралство Белгия между лабораторията ФОИХ (ИОХ с ЦФ - БАН) и лабораторията по теоретична и приложна химия (университет *Notre Dame de la Paix* - Намюр). На два от тях тя е научен ръководител.

Съгласно направената класификация от д-р Спасова, научните изследвания/приноси са в четири основни направления: *i)* методологични изследвания; *ii)* зависимост на нелинейните молекулни свойства от конформационни фактори, депротониране и заместване с хетероатоми; *iii)* изследване на хирооптични и нелинейни оптични свойства на клас хомо- и хетерохелицени; и *iv)* изследвания с методологичен и приложен характер - комбинирано приложение на спектроскопски техники и теоретични (*ab initio*) методи. По първото направление са изследвани молекулните поляризуемости от първи, втори и трети порядък на малки моделни системи и на различно дълги неутрални и заредени полиацетилени. Публикациите са рецензирани от международни рецензенти - експерти в областта, но не става ясно защо са провеждани предимно CIS и TDHF изчисления, които са сравнявани с MP2 и CCSD(T) изчисления (налични към момента) на други изследователи: например  $\alpha_{xx}$ ,  $\alpha_{yy}$  и  $\alpha_{zz}$  в публикация 4. Както и самата кандидатка показва в тази работа, MP2 и CCSD(T) стойностите са много по-близки до експерименталните.

По второто и третото направление са изследвани НЛО свойствата на квадратната киселина и депротонирана ѝ форма (предполагам идея, предложена от проф. Цонко Колев); така също и на някои петчленни хетероцикли (тиазолидин-2,4-дион и имидазолин-2,4-дион и техни серни аналози). Важен принос е установяването на факта, че екзоцикличните хетероатоми имат много по-съществено влияние върху изчислените НЛО



коэффициенти от хетероатомите в цикъла. Изследвани са спектралните характеристики и НЛО свойствата на триариламин-хелицени и различно заместени тетратиахелицени. Бих препоръчал в бъдещите изследвания на д-р Спасова да залегнат корелационно-съвместими би- или триекспоненциални базисни набори, а не валентно-разцепени, тъй като при първите се получават по-прецизни резултати. Това се отнася също за използването на методи с отчитане на електронната корелация. Също така, TD DFT изчисленията не са сред най-подходящите за изчисляване на вертикалните енергии на възбуждане (публикация 14).

По четвъртото направление са проведени експериментални и теоретични изследвания на перилени, алкани и хлоралкани, 2-аминобензимидазол, и на новосинтезирано съединение - 3,6-бис(4,5-дихидроксиоксазо-2-ил) бензен-1,2-диол. Публикациите са демонстрация на ползотворното комбиниране на теорията с експеримента с цел да се обяснат спектралните характеристики на веществата и да се установят кинетичните параметри на процесите на протонен пренос. Според кандидатката, една от публикациите (13) е избрана за най-добра работа на ИОХ с ЦФ за 2006 г. и е включена в обобщения отчет за петгодишния период - 2004 - 2008 г.

Добро впечатление правят посочените перспективи за бъдеща изследователска работа. Понастоящем, планиваните теоретични изследвания на полиароматни съединения на високо теоретично ниво са напълно осъществими в предвид на изградената изчислителна мощност в ИОХ с ЦФ.

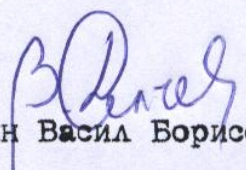
## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Материалите по процедурата отговарят на всички изисквания на ЗРАСРБ и неговите правилници. Проведените от доктор Спасова изследвания представляват оригинален принос в науката с високо международно признание, което е видно от цитируемостта на работите и високия h-индекс (10). Според мен, кандидатката е изграден учен в своята област и е в състояние самостоятелно да ръководи своя изследователска група, да задава научни задачи и да участва в дискусии - умения, необходими за заемане на длъжността "доцент" на ИОХ с ЦФ, БАН.

Поради гореизложеното, убедено давам своята положителна оценка за кандидатурата на д-р Спасова и препоръчвам на почитаемото Научно жури да предложи на научния съвет на ИОХ с ЦФ (БАН) да избере гл. ас. д-р Милена Иванова Спасова на академичната длъжност "доцент" по област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление: 4.2. Химически науки; научна специалност: "Теоретична химия".

гр. Пловдив  
4.09.2013 г.

Изготвил становището:

  
(доц. д-р Васил Борисов Делчев)