

## СТАНОВИЩЕ

от Петко Маринов Иванов, дхн, професор в ИОХЦФ-БАН

по конкурса за заемането на академичната длъжност “ДОЦЕНТ” в Институт по органична химия с Център по фитохимия, БАН по професионално направление 4.2 Химически науки (теоретична химия, щифър на научна специалност, 01.05.01), обявен в ДВ бр. 48/31.05.2013 год.

*Единствен кандидат:* Милена Иванова Спасова, д-р, главен асистент

Д-р Спасова е магистър по физика със специализация „Физика на твърдото тяло” (1992 г.), СУ „Св. Климент Охридски”. Придобила е ОНС ДОКТОР през 2003 г. като е защитила дисертация в областта на теоретичната химия, изработена в ИОХЦФ-БАН, по проблематика поставила основите за бъдещите и изследвания: „Ab initio изследвания на структурата и нелинейните оптични свойства на органични молекули”. Започва работа в ИОХЦФ-БАН като химик в лаб. ЯМР. Последователно н.с. III ст. в лаб. ТХ (1995 г. – 1999 г.), н.с. II ст. в лаб. ФОИХ (1999 г. – 2005 г.) и н.с. I ст. в същата лаборатория (от 2005 г.). Гл. ас. Спасова има трудов стаж 19 г. като същите са по специалността и в ИОХЦФ-БАН. Специализирала е в университета в Намюр, Белгия (2004-2005 г.).

Общият брой публикации на д-р Спасова е 21, от които 5 са включени в дисертационния и труд за придобиване на ОНС „доктор”. В конкурса се представя с 21 научни публикации от които 16 са в 9 различни престижни международни списания с импакт фактор, две са в поредици и 4 в български списания (19 работи в списания с импакт фактор). Повече от половината публикации са с повече от четирима съавтори (две с 9; една с 10). Това е индикация че г-жа Спасова притежава ценното качество за работа в екип. Няма самостоятелни научни съобщения. Изнесла е 4 доклада при посещения в чужди университети и 3 доклада на международни и национални форуми; 6 постера на международни конференции и 2 на национални форуми. 76% от публикациите са цитирани общо 262 пъти, като за една от тях са намерени 62 цитата.  $h=10$ .

Има участие в три проекта финансирани от НФНИ; участник в шест и ръководител на два научни проекта изпълнявани по линия на сътрудничество на БАН с Кралство Белгия (университет в Намюр). Това плодотворно международно сътрудничество е в основата на повечето от проведените от г-жа Спасова изследвания.

В справката за научни приноси г-жа Спасова формулира насочеността на изследователската си активност като акцентира върху *„теоретичното изследване на линейните (поляризуемости), нелинейните (хиперполяризуемости) оптични и хирооптични свойства на органични молекулни системи чрез приложение както на стандартни квантово-химични подходи, така и на новоразработени приближения; решаване на структурни и спектроскопски проблеми и предсказване на молекулни свойства.”*

Най-първи изследвания на кандидата са под ръководството на покойния колега ст.н.с. д-р Иво Кънев по оценка и развитие на методи за изследване на NLO свойства (молекулни поляризуемости от първи, втори и трети порядък ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ) на органични молекули). Акцентът е върху приближението „сума по състоянията” (SOS) основаващо се на TDPT, като са проучени два опростени модела за бърза оценка на статичните поляризуемости от първи и по-висок порядък и са изведени изрази за тензорните компоненти на молекулната хиперполяризуемост от първи и втори порядък в рамките на приближението на средната енергия на възбуждане при квантовите системи. За първи път е извършено и систематично изследване на *ab initio* ниво в рамките на SOS, при което вълновите функции и енергиите са получени по метода CI, включвайки

едноелектронните възбуждания (CIS - Configuration Interaction/Singles). Разработена е компютърна програма  $\alpha\beta$ -SOS за изчисляване на статичните и честотно-зависимите тензорни компоненти на поляризуемостта ( $\alpha$ ) и първата хиперполяризуемост ( $\beta$ ). Това е значим принос и напълно основателно би могло да се разглежда като допълнителна публикация представяща софтуерен продукт (тази разработка е цитирана в работите със съавторите). След кончината на колежата Кънев, изследванията продължават в сътрудничество с университета в Намюр, Белгия. Разработените и тествани върху моделни системи (малки молекули) методични подходи са приложени за третиране и на типична донор-акцепторна система  $\alpha,\omega$ -нитро-амино-1,3,5-хексатриен [3], квадратната киселина [5] и петчленни хетероцикли ([7] - публикация в която г-жа Спасова е отговорен автор), новосинтезирани тиоспирохидантоини [9].

Друга група от пет научни съобщения представят резултати от неемпирично изследване на спрегнати системи, съдържащи зарядов дефект. Обект на изследване е транс-полиацетилен. В подобни системи при ниски концентрации на дотиране може да се постигне увеличение на 10-15 порядъка на електричната проводимост. Предложено е теоретично *ab initio* изследване на високо ниво на надлъжните поляризуемости ( $\chi$ ) и втори хиперполяризуемости ( $\chi^{(2)}$ ) на олигомери на полисилол, съдържащи до 9 звена силол [17]. Изследвани са различни фактори, влияещи върху нелинейните оптични свойства (окисление, природа на спиралната верига при хомо- и хетерохелицени [12, 12a]). Хироптични свойства са изследвани за клас мостови триариламин-хелицени (TDDFT/B3LYP/6-31+G(d)) и влиянието върху тези свойства на размера на спиралата и наличието на заместители [14]. Проучени са нов тип перилени, съдържащи силни донорни заместители [19]. Установено е значително батохромно отместване в електронната абсорбция и силен положителен солватохромизъм, дължащи се на силен вътрешно-молекулен пренос на заряд. Силната абсорбция в близката инфрачервена област квалифицира тези хромофори като подходящи за сензори и соларни клетки, като индикатори за полярност на разтворители, за фото- и нелинейни оптични приложения. Комбинирано теоретично и спектрално изследване на  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР химичните отмествания на серия от алкани и техните хлорни производни валидира надеждността на теоретичните методи за оценка на химичните отмествания [13]. Изследвано е тавтомер-димерно равновесие при 2-аминобензимидазол [18], предложена е моделна кето-енолна тавтомерна система с малка разлика в енергиите на тавтомерните форми и сравнително ниска активационна бариера [20], теоретично и експериментално са изследвани абсорбцията и флуоресценцията в етанол на новосинтезирано съединение 3,6-бис(4,5-дихидроксиоксазо-2-ил)бензен-1,2-диол [21]. Всички тези приложения имат като резултат полезни нови структурни данни и информация за молекулни свойства на органични системи с потенциално приложение в нелинейната оптика.

Като ръководител на лаб. ФОИХ на ИОХЦФ-БАН съм останал с отлични впечатления от г-жа Спасова като етичен, коректен колега, като учен с необходимата квалификация самостоятелно да решава сложни научни проблеми.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ:** Направеният анализ на представените за конкурса материали ми дава основание да дам положителна оценка за творчеството на кандидатата и с дълбоко убеждение да подкрепя избирането на гл. ас. д-р Милена Иванова Спасова на академичната длъжност "ДОЦЕНТ" в ИОХЦФ-БАН.

София, 27 септември 2013 г