

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурса за академичната длъжност Доцент по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия“, към лабораторията по Структурен органичен анализ на Института по органична химия с Център по фитохимия при БАН, обявен в брой 88 на ДВ от 24.10.2014 г.,
с кандидат гл. ас. д-р **Деница Янчева Панталеева**

от проф. д-р Тодор Минков Дудев

Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“

В конкурса за доцент по Химически науки (Органична химия) към лабораторията по Структурен органичен анализ на Института по органична химия с Център по фитохимия при БАН участва само един кандидат – гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева. За участие в конкурса кандидатът е представил пълен комплект от документи в съответствие с изискванията на Правилника за прилагане на Закона за развитието на академичния състав в Република България. Материалите са подготвени с внимание и прецизност.

Деница Панталеева е възпитаник на Химическия факултет на Софийския университет, където през 1999 година завършва магистратура по органична и аналитична химия. През периода 2000 – 2003 година е редовен докторант в Института по органична химия с Център по фитохимия при БАН. Защищава успешно докторска дисертация през 2003 година на тема „Синтез, спектрални и структурни изследвания на нови електро-оптични и фотореактивни материали“. През същата година е назначена за химик към ИОХЦФ-БАН, а година по-късно, след спечелен конкурс – за главен асистент към същия институт. Провела е няколко краткосрочни специализации в университетите в Кайзерслаутерн и Дортмунд (Германия).

За конкурса кандидатът е представил 32 научни публикации (отпечатани след получаване на образователната и научна степен „Доктор“) в реферирани международни списания, 29 от които притежават импакт фактор. Сумарният импакт фактор от тези публикации е 47.785. Върху тях са забелязани 78 цитата (без самоцитиране). Като цяло, Деница Панталеева е съавтор на 41 публикации, които, според справката на кандидата, са цитирани 110 пъти в литературата (170 цитата според Web of Science). Индексът на Hirsch е 9. Преобладаващият брой статии са резултат от сътрудничеството на д-р Панталеева с групи с различно профилиране от няколко научни институти/държави. Впечатляващ е броят на научните форуми – 22, на които са представени (чрез постери или устни доклади) резултати от изследванията на д-р Панталеева.

Изследователската дейност на д-р Панталеева е насочена към дизайн, синтез и структурно/спектрално охарактеризиране на нови органични молекули с потенциално приложение в нелинейната оптика, фармакологията и биохимията. Използвани са техники като рентгенова кристалография, вибрационна и електронна спектроскопия, ЯМР спектроскопия, електро-оптични абсорбционни измервания, термогравиметричен анализ и молекулно моделиране.

Научните приноси на кандидата са групирани в следните направления:

1. Дизайн, синтез, спектрални и структурни изследвания на органични материали за нелинейно-оптични и фоторефрактивни приложения (публикации 1 – 13)

Интересът на д-р Панталеева към изследвания на нови органични материали за нелинейната оптика произтича от тяхното потенциално приложение в областта на телекомуникацията, оптичните компютърни технологии и оптичното съхранение на информация. Тези материали имат предимство в сравнение с традиционните неорганични материали по отношение на цена, степен на нелинейно-оптична възприемчивост и термична устойчивост. Изследвана е голяма група от органични молекули, включваща производни на резорцинола, моно/диметоксибензалдехида и квадратната киселина. Извършен е насочен синтез с цел получаване на материали с

нелинейно-оптични свойства от по-висок порядък, като са оптимизирани преносно-зарядните и оптични характеристики на изследваните обекти. За целта са използвани различни подходи: превръщане на неутралните съединения в соли, дизайн на силно спрегнати системи, съдържащи електроноакцепторни и електронодонорни заместители, както и синтезирането на производни на квадратната киселина, които притежават голям диполен момент, локализиран в относително малък молекулен обем, и се характеризират с ниско лежащи интензивни абсорбционни преходи във видимата област. Структурата и спектралните свойства на получените молекули са детайлно изследвани с помощта на палитра от експериментални (рентгенова кристалография, абсорбционна UV/VIS спектроскопия, FTIR спектроскопия, електро-оптични абсорбционни измервания, термогравиметричен анализ) и теоретични (*ab initio* и DFT изчисления) методи. Получена е ценна информация относно структурата на молекулите, а така също и за разпределението на електричните заряди и величината на молекулната хиперполяризуемост в изследваните обекти. Изчисленията с помощта на квантово-химични методи молекулни спектри в инфрачервената и UV/VIS области хвърлят светлина върху природата на съответните вибрационни и електронни преходи в новосинтезираните молекули. Анализът на получените резултати показва, че изследваните обекти притежават добър потенциал като материали с нелинейно-оптични свойства от втори и трети порядък, тъй като се характеризират с висока температурна устойчивост, съчетана с оптимална оптична пропускливост и нелинейно-оптична ефективност.

2. Насочен дизайн, синтез и охарактеризиране на съединения от фармакологичен интерес (публикации 14, 15, 17-20, 22-26 и 29)

Значителна част от трудовете на Деница Панталеева са посветени на синтеза и охарактеризирането на структурата, спектралните отнасяния и биохимичните свойства на биологично активни молекули. Централно място заемат изследванията върху цикличните дидепсипептиди – група от природни или синтетични/полусинтетични молекули, които проявяват противотуморно, антибактериално, противогъбично, имуноподтискащо или противовъзпалително

действие. В резултат на съчетано използване на широк набор от експериментални и теоретични подходи са охарактеризирани структурата, спектралните и биохимични отнасяния, както и възможните механизми на терапевтично действие на серия от производни на цикличните дидепсипептиди. Получени са следните резултати:

- Синтетичните 3-(2-метилпропил)-6-(пропан-2-ил)-4-метил-морфолин-2,5-дион и 3,6-ди(пропан-2-ил)-4-метил-морфолин-2,5-дион дидепсипептиди имат стимулиращ ефект върху тимоцити от плъх и биха могли да се използват като имуностимуланти; Двата циклодидепсипептида проявяват и умерен антиоксидантен потенциал спрямо свободния 2,2-дифенил-1-пикрилхидразил радикал и калиев фeroцианид.
- Различната структура на 6-(propan-2-yl)-3-methyl-morpholine-2,5-dione, в сравнение с горните две структури, обуславя промени в неговата биохимия, в резултат на което това съединение инхибира пролиферацията на тимоцитите чрез пораждаване на оксидативен стрес и цитотоксичност;
- Демонстрирано е (за пръв път), че 1,4-морфолин-2,5-дионите могат да инхибират ензима ксантинооксидаза и да проявяват антивъзпалително действие; Имат потенциала да се прилагат като средство за лечение на подагра и други възпалителни състояния.

3. Квантовохимично и експериментално изследване на ИЧ спектрални и структурни промени, породени от превръщането на органични молекули в съответните аниони, дианиони и радикали (публикации 16, 21, 28, 30, 31)

Инфрачервена спектроскопия в комбинация с квантово-химични пресмятания е използвана за установяване на факторите, които управляват трансформацията на неутрални органични молекули в съответните радикали и аниони. Детайлно е анализирано влиянието върху процеса на трансформация на промени в геометричната структура на молекулите и хибридизацията на съответните атоми, флуктуации в разпределението на електронната плътност, както и вариации в силовото поле на изследваните обекти.

Заклучение

Представените от кандидата публикации са по темата на конкурса и представляват оригинални научни разработки със значителен принос в областта на фундаменталната и приложна органична/биоорганична химия. Изследванията са проведени на високо научно ниво, като са използвани state-of-the-art експериментални и теоретични подходи. Хвърлят светлина върху нови аспекти от химията/биохимията на изследваните класове от молекули. Резултатите могат да бъдат използвани като ръководни принципи за синтезиране на нови съединения с подобрени качества в съответните области. Приложените материали по конкурса ми дават основание да смятам, че кандидатът е изграден учен с дълбоки познания и практически умения от областта на органичната, биоорганична и теоретична химия, както и молекулната спектроскопия. Д-р Панталеева демонстрира творческо мислене и умение да подбира и решава успешно задачи от съществено значение за науката и практиката.

Кандидатът е бил ръководител на дипломант, успешно защитил магистърска дипломна работа през 2012 година. Също така е ръководил стажанти, докторанти и млади учени в рамките на студентски практики и летни обучителни школи.

В заключение, в резултат на гореизложеното, считам убедено, че със своята научно-преподавателска дейност гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева напълно отговаря на всички изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност „Доцент“. Предлагам тя да бъде избрана за Доцент към лабораторията по Структурен органичен анализ на Института по органична химия с Център по фитохимия при БАН.

12.Март.2015 г.

Проф. д-р Годор Дудев