

Рецензия

по конкурса за академичната длъжност **доцент**
по професионално направление 4.2. Химически науки (органична химия)
за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ” към Институт по органична
химия с център по фитохимия – БАН

от проф. дхн Венелин Енчев
Институт по органична химия с център по фитохимия – БАН

В обявения в Държавен вестник, бр. 88/24.10.2014 г., конкурс за **доцент** по „Органична химия” в Института по органична химия с център по фитохимия към БАН участва само един кандидат – гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева. Документите са подготвени съгласно изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България и Правилника за неговото приложение.

Биографични данни

Деница Панталеева е родена на 24 януари 1975 г. в гр. Бургас. Дипломира се през 1999 г. като магистър по химия (специалност *органична и аналитична химия*) в Химическия факултет на Софийския университет „Свети Климент Охридски”. През следващата година е зачислена като редовен докторант в Института по органична химия с център по фитохимия – БАН, а три години по-късно, през 2003 г., защитава дисертацията си “Синтез, спектрални и структурни изследвания на нови електро-оптични и фоторефрактивни материали” и получава научната и образователна степен *доктор*. След защитата на дисертацията заема длъжността главен асистент в лаборатория „Структурен и органичен анализ”, където работи и до сега.

Била е на две краткосрочни специализации във водещи лаборатории в областта на спектрални и структурни изследвания на органични материали в университетите в Кайзерслаутерн и Дортмунд в Германия.

Научни трудове, научни приноси и наукометрични данни

Д-р Деница Пантелеева участва в конкурса със **32 публикации**. От тях **29** са в списания с импакт фактор: по **4** в *Journal of Molecular Structure* (1.599); *Zeitschrift für Kristallographie – New Crystal Structures* (0.118), *Bulgarian Chemical Communications* (0.320); по **3** в *Acta Crystallographica E* (0.347) и *Food Chemistry and Toxicology* (2.610); **2** в *Chemical Physics* (2.028) и по **една** в *Advanced Functional Materials* (10.4), *Amino acids* (3.653), *European Journal of Medicinal Chemistry* (3.432), *Journal of Molecular Catalysis B – Enzymatic* (2.745), *Molecules* (2.095), *Computational and Theoretical Chemistry* (1.368), *Monatshefte für Chemie* (1.347) и *Acta Chimica Slovenica* (1.135).

Две публикации са в издания без импакт фактор – *Списание на Българската академия на науките* и *Asian Chemistry Letters*. Една публикация е в сборник на конференция – *Proceeding of the 48th Meeting of the Serbian Chemical Society*.

Всъщност общият брой на публикациите на д-р Пантелеева е 41. Тя не е включила девет публикации, свързани с нейната дисертация за образователната и научна степен „доктор”.

Прави впечатление силната публикационна активност на д-р Пантелеева през последните 3 години. Излезли от печат са общо 15 статии – 6 през 2012 г., 2 през 2013 г. и 7 през 2014 г.

Впечатляващ е броят на научните форуми – 22, на които тя е представила резултатите от своите изследвания.

Забелязани са общо **110** цитата на **24** от нейните научни трудове, **32** от които на публикации, включени в нейната дисертация и **78** на публикации извън дисертацията. Индексът на Hirsch е 9.

Д-р Деница Панталеева е ръководила три научно-изследователски проекта, финансирани от национални и чуждестранни фондове и е била участник в още 6.

Представените за участие в конкурса научни трудове са в областта на органичната химия. Те се отнасят до получаването и структурното охарактеризиране на нови органични съединения и възможностите за приложението им като материали за нелинейната оптика, биологично активни молекули и интермедиати в органични реакции.

Според мен основните научни приноси на изследователската работа могат да бъдат обобщени тематично в две направления:

- Дизайн, синтез, спектрални и структурни изследвания на нови органични материали за нелинейно-оптични и фоторефрактивни приложения (публикации 1-13)
- Насочен дизайн, синтез и охарактеризиране на съединения от фармакологичен интерес (публикации 14, 15, 17-20, 22-26 и 29)

Първото тематично направление включва публикации с номера от 1 до 13 от приложения списък и е продължение на работата по нейната дисертация за образователната и научна степен *доктор*. Интересът към изследвания на нови органични материали за нелинейната оптика вероятно се дължи на тяхното потенциално приложение в областта на оптичните компютърни технологии и оптичното съхранение на информация. Изследвани са няколко органични съединения – 4,6-динитрорезорцинол, 4-хидрокси-3-метоксибензалдеhid, диметокси-бензалдеhid и пиридинио-бетаини на квадратната киселина. Проведен е насочен синтез за получаване на материали с нелинейно-оптични свойства от по-висок порядък. Синтезирани са производни на квадратната киселина, които имат голям диполен момент и се характеризират с интензивни абсорбционни преходи във видимата област.

Получена е важна информация относно структурата на изследваните молекули и тяхната хиперполяризуемост. Изчислените, посредством квантово-химични методи, молекулни спектри в инфрачервената, видимата и ултравиолетовата области дават възможност да се изясни природата на вибрационните и електронните преходи в посочените по-горе съединения. Според спектралните и структурни изследвания пиридинио-бетаините на квадратната киселина притежават потенциал като материали с нелинейни оптични свойства от втори и трети порядък. Те се характеризират с висока температурна устойчивост (топят се или се разлагат при температури над 300 °C), съчетана с оптимална оптична пропускливост и нелинейно-оптична ефективност. Пиридинио-бетаините на квадратната киселина са кристални, което благоприятства практическото им приложение.

Второто тематично направление включва 12 публикации на д-р Панталеева, публикувани през последните 7 години. В тях са описани синтеза, структурата и биохимичните свойства на биологично активни молекули с потенциално приложение в биомедицината. Основно място заемат изследванията върху цикличните дидепсипептиди, 3- и 6-заместените 1,4-морфолин-2,5-дионов производни, залегнали

в тематиката на двата младежки проекта на д-р Панталеева. Интересът към тях е породен от факта, че те проявяват противовъзпалително, противотуморно, противогъбично, антибактериално и имуноподтискащо действие. За охарактеризиране на структурата, спектралните и биохимични отнасяния, и възможните механизми на терапевтично действие на производни на цикличните дидепсипептиди са използвани както експериментални, така и теоретични подходи.

За пръв път е показано, че 1,4-морфолин-2,5-дионите могат да инхибират ензима ксантинооксидаза и да проявяват антивъзпалително действие. Поради това има възможност да се прилагат като средство за лечение на подагра и други възпалителни състояния. По-конкретно, при изследване на инхибиторна активност на 3-(2-метил-пропил)-6-(пропан-2-ил)-4-метил-морфолин-2,5-дион и 3,6-ди-(пропан-2-ил)-4-метил-морфолин-2,5-дион спрямо търговски ензим ксантинооксидаза е установено и противовъзпалително действие. Изследването на антиоксидантните свойства на двата циклодидепсипептида показва, че те проявяват умерен антиоксидантен потенциал спрямо свободния 2,2-дифенил-1-пикрилхидразил радикал и калиев фeroцианид. Показано е също, че механизмът на антиоксидантно действие зависи от полярността на средата. Откъсването на водороден атом е енергетично най-изгодният процес в неполярна среда, докато в полярна среда предпочетен механизъм е отделянето на протон, последвано от пренос на електрон.

Изследвана е една група съединения, 2-амино-5-алкилидентиазол-4-они, като подходящи инхибитори на липидното окисление. Според направените квантово-химични изчисления като най-вероятен механизъм на действие при тях е този, при който става пренос на електрон.

Има и една група от статии (публикации 16, 21, 28, 30, 31), в които комбинация на инфрачервена спектроскопия с квантово-химични пресмятания е използвана за установяване на промените, които настъпват при трансформацията на неутрални органични молекули в съответните радикали и аниони. Подробно е анализирана промяната в геометричната структура на молекулите, промените в характеристичните честоти, както и флукуациите в разпределението на електронната плътност. Тази група работи са част от дългогодишната изследователска дейност на лаборатория „Структурен органичен анализ”.

Преподавателска дейност

Д-р Панталеева има значителен педагогически опит и организаторска дейност. Тя е в основата на организацията на 5 международни летни школи по инструментални методи за анализ към Центъра за приложна спектроскопия от 2004 г. до 2007 г. и 2013 г. с общо 90 участника.

Има 1 отлично защитил дипломант в Химико-технологичния и металургичен университет през 2012 г.

Ръководила е 10 стажанта към студентска практика „Анализ на храни и хранителни добавки чрез ИЧ спектроскопия“ по проект „Студентски практики”, финансиран по ОП „Развитие на човешките ресурси“, съфинансирана Европейския социален фонд през 2014 год.

Ще отбележа, че познавам гл. ас. д-р Деница Панталеева като изключително добронамерен и коректен колега. Впечатлен съм от голямото ѝ желание да обучава и работи със студенти и млади учени и старанието, с което го прави.

Заклучение

Научната продукция на гл. ас. д-р Деница Янчева, 41 научни публикации, цитирани 110 пъти в научната литература, индекс на Хирш – 9, нейната преподавателска и организаторска дейност, както и личните ми впечатления ми дават основание убедено да предложа на почитаемото Научно жури да гласува за присъждане на гл. ас. д-р Деница Янчева академичната длъжност **доцент** по научната специалност "органична химия".

18.03.2015 г.

Венелин Енчев