

Становище

от доц. д-р **Анелия Ценова Маврова**,
член на научното жури в конкурс за заемане на академичната длъжност **ДОЦЕНТ** по
професионално направление 4.2. *Химически науки, Научна специалност Органична химия,*
за нуждите на лаборатория "Структурен органичен анализ"

1. Сведение за конкурса

Конкурсът за Доцент по професионално направление 4.2. *"Химически науки", Научна специалност "Органична химия"* е обявен от Института по Органична химия с Център по фитохимия при БАН, София в ДВ бр. 88 от 24. 10. 2014 г. за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ“. Единствен кандидат за участие в конкурса е д-р Деница Янчева Панталеева, главен асистент в Института по органична химия с Център по фитохимия-БАН.

2. Кратки биографични данни за кандидата, гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева

Д-р Панталеева е родена на 24. 01. 1975 година в гр. Бургас. През 1994 година завършва Езикова гимназия за романски езици в гр Бургас, през 1994 година става студентка в Химическия Факултет на Софийския университет и през 1999 година се дипломира като магистър-химик по органична и аналитична химия. През 2000 г е зачислена като редовен докторант в Института по органична химия с Център по фитохимия, с научен ръководител проф дхн Цонко Колев. През 2003 година придобива образователната и научна степен „доктор“ след успешна защита на дисертационния си труд на тема „СИНТЕЗ, СПЕКТРАЛНИ И СТРУКТУРНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ НА НОВИ ЕЛЕКТРО-ОПТИЧНИ И ФОТО-РЕФРАКТИВНИ МАТЕРИАЛИ“. През януари 2003 година заема длъжността химик, а от май 2004 година е главен асистент в Института по органична химия с Център по фитохимия на БАН.

3. Учебно-преподавателска дейността гл. ас.д-р Деница Янчева Панталеева се състои в:

А) Ръководство на дипломанти:

Гл.ас. Деница Янчева е ръководител на дипломната работа на Неда Орлинова Анастасова на тема „Синтез и спектрално изследване на циклодидепсипептиди и нециклични дипептидни производни“ за придобиване на образователно-квалификационна степен „магистър“, ХТМУ, 2012 г.

Б) Ръководство на студентска практика на тема: „Анализ на храни и хранителни добавки чрез ИЧ спектроскопия“; Д-р Панталеева е ръководила стаж на 10 студента през 2014 година.

В) Ръководство на студенти, докторанти и млади учени – в рамките на международни летни школи по инструментални методи за анализ към Центъра за приложна спектроскопия:

- 15 участници – международна лятна школа "Applied Vibrational Spectroscopy and" Applied Vibrational Spectroscopy and X-Ray Analysis", 2004 г.

- 15 участници - международна лятна школа „X-Ray, IR and Raman Spectroscopy Application“, 2005 г.

- 20 участници - международна лятна школа „X-Ray, IR and Raman Spectroscopy Application“, 2006 г.

- 20 участници - международна лятна школа „X-Ray, IR and Raman Spectroscopy Application“, 2007 г.

- 20 участници - международна лятна школа „Application of FTIR spectroscopy and X-ray diffraction for analysis of food and food additives“, 2013 г.

4. Участия в изследователски проекти и договори на гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева (за периода 2002 – 2014 г.)

* Като член на колектив д-р Панталеева е участвала в 6 проекта, финансирани от национални и чуждестранни фондове;

*Д-р Панталеева е ръководител на 3 проекта, финансирани от национални и чуждестранни фондове

5. Научно-изследователска дейност гл. ас. д- Деница Янчева Панталеева

Д-р Панталеева е представила **41** труда, от които в конкурса участва с **32**, а останалите са свързани с придобиването на ОНС „доктор”, от тях

- **29** бр. са публикувани в списания с импакт фактор;
- **2** бр в списания без индексация;
- **1** бр. в материали от доклади на конгреси;

Общият импакт фактор от участващите в конкурса научни трудове е **37,63**. Върху всички трудове са забелязани общо **110** цитата, а без публикациите за ОНС „доктор” броят на цитатите е **78**, болшинството от които са в реномирани научни списания.

Част от научните трудове са разработени във връзка с изпълнението на научните проекта, в които кандидатката е участвала и тези на които е била ръководител.

6. Приноси на научните трудовена на гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева

Научните приноси на гл. ас. Деница Панталеева, включени в представените трудове са главно в областта на органичната химия, и по-специално в получаването, спектралното и структурното идентифициране на нови органични съединения във връзка с приложението им като нови материали за нелинейната оптика, нови биологично активни вещества или важни интермедиати в органичните реакции.

Основните приноси на научните разработки могат да се обобщят накратко в следните направления:

I. Дизайн, синтез, спектрални и структурни изследвания на органични материали за нелинейно-оптични и фоторефрактивни приложения.

Приносите в тази област включват:

- Разработването и синтеза на органични материали с нелинейно-оптични(НЛО) свойства;

- Дизайн на материали, подходящи не само за генериране на втора хармонична вълна, но и с НЛО свойства от по-висок порядък. Изследвани са различни органични съединения за намиране на оптималните преносно-зарядни и оптични характеристики, изследвани са също линейните и нелинейните оптични и вибрационни свойства на молекулно ниво и охарактеризиране на кристалната структура на материала.

- Генериране на силно спрегнати системи, съдържащи електрондонорни и електронакцепторни заместители, с цел получаването на производни на 4-хидрокси-3-метоксибензалдехида и диметоксибензалдехида (публикации 2, 3, 8).

- Определяне на молекулната структура, нетните електрични заряди и диполните моменти на различно заместени пиридинно-бетаини на квадратната киселина чрез RHF и V3LYP квантовохимични пресмятания (публикации 5, 6, 8, 10-13).

- Установяване влиянието на молекулната конфигурация върху линейните и нелинейните оптични свойства и структура на заместени хромофори с помощта на електрооптични абсорбционни измервания и квантовохимични изчисления (публикации 12 и 13).

- Установено е, че молекулните хиперполяризуемости зависят силно от природата на заместителя в пиридиниевото ядро и нарастват значително при преминаване от донорен към ацепторен заместител. Най-висока молекулна хиперполяризуемост е установена при 4-бензоилпиридинно-бетаина на квадратната киселина, който освен това кристализира и нецентросиметрично (публикации 10, 12, 13).

II. Насочен дизайн, синтез и охарактеризиране на съединения от фармакологичен интерес.

Научните приноси, отнасящи се до второто направление (публикации 14, 15, 17-20, 22-26, и 29) могат да бъдат обобщени както следва:

- оптимизиране и дефиниране на синтетичните условия за получаване на нови органични съединения от фармакологичен интерес;
- приложението на спектроскопски техники като ИЧ и ЯМР за охарактеризиране на новосинтезираните съединения, придружено с детайлен теоретичен анализ за определяне на пространствената и електронна структура на веществата.
- синтез на циклични диспептиди, като биологично активни молекули;
- охарактеризиране на молекулната структура на съответните диастереоизомери и вибрационните им спектри чрез DFT пресмятания и ИЧ спектроскопия (публикация 14).
- създаване на метод за синтезиране циклодиспептиди, съдържащи α -хидроксиизовалерианова част и изследване на конформационния им изомеризъм, електронна структура и вибрационни спектри както и прототропната изомерия (публикация 17).;
- за първи път е установено свойството на 1,4-морфолин-2,5-дионите да инхибират ензима ксантиноксидаза (ХО) и да проявяват антивъзпалително действие (публикация 22)
- Установен е механизъм на действие 2-амино-5-алкилидентиазол-4-они, изследвани като обещаващи инхибитори на липидното окисление.
- Чрез квантово химични пресмятания е доказан електронният пренос (SET) като най-вероятен механизъм на действие на тиазолоните (публикация 24).
- Установено е, че основна роля за инхибиране на липидното окисление играе общия алкилидентиазолонов фрагмент (публикация 24).

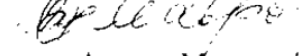
III. Квантовохимично и експериментално изследване на ИЧ спектрални и структурни промени, породени от превръщането на органични молекули в съответните аниони, дианиони и радикали

- Изследвани са структурата, разпределението на заряда и електронното спрежение между функционалните групи, съпътстващи превръщането на р- и m-динитробензен в съответните радикал-аниони, чрез B3LYP/6-311++G** пресмятания (публикация 21). –
- Чрез изследване на вибрационните спектри на неутралните съединения и радикал-анионите и анализ на електронната плътност е установено, че анионите се характеризират с хиноидна структура, както и с по-силно електронното спрежение от неутралните съединения, което обхваща по-голяма част от молекулата (публикация 21).
- Чрез същия комбиниран подход е установено образуването на метоксидни и цианидни адукти на заместения малонитрил (публикация 16).
- Приложени са квантовохимични пресмятания за охарактеризиране структурата и вибрационните спектри на разнообразно заместени бензофенони и техните анион-радикали (кетили) (публикации 28, 30, 31).
- Установено е че, отлична корелация между спиновата плътност локализирана върху карбонилната група на кетилите и понижението на карбонилната честота в ИЧ спектъра показва, че разпределението на допълнителния електрон е основен определящ фактор;
- Счита се, че комбинираният подход може да се прилага успешно за предсказването на спектралните и структурните промени, породени от превръщането и на други молекули в радикал-аниони;

7. Заключение

Вземайки под внимание наукометричните показатели на гл. ас д-р Деница Янчева Панталеева, които отговарят напълно на препоръчителните изисквания от Правилника за условията и реда на заемане на академичната длъжност „Доцент” в ИОХ ЦФ, добрата ѝ педагогическа и организационна дейност, убедено предлагам на Научното жури и на НС да избере гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева за „Доцент” по професионално направление 4.2 „Химически науки”, Научна специалност „Органична химия”.

10. 03. 2015 г.
София

Подпис: 
/Доц. д-р инж. Анелия Маврова/