

## СТАНОВИЩЕ

**Относно:** Участие на гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева в конкурс за длъжност “Доцент” по Професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия“ за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ” при ИОХЦФ-БАН.

**Член на научно жури** съгласно заповед НО-05-05-5/ 02.02.2015 г.: *доцент д-р Иванка Б. Стойнева*, Институт по Органична химия с Център по фитохимия – БАН

Конкурсът за “Доцент” по Професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия“ е за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ” при ИОХЦФ-БАН и е обнародван в брой 88 на ДВ от 24.10.2014 г. В срок са подадени документи за участие в конкурса с единствен кандидат гл. ас. д-р Деница Панталеева. Процедурата по разкриване и обявяване на конкурса е спазена и документите са подготвени съгласно изискванията на Закона за развитие на академичния състав в РБ и Правилника за неговото приложение в ИОХЦФ -БАН.

### 1. Кратки лични и професионални данни за кандидата

Гл. ас. д-р Деница Панталеева е завършила Химически факултет - СУ “Св. Кл. Охридски” през 1999 г. като магистър по органична и аналитична химия с много добър успех. В периода 2000-2003 г. е редовен докторант в ИОХЦФ –БАН с научен ръководител проф. Цонко Колев. След успешна защита на докторската дисертация 2004 г. е назначена като н.с. I ст. (сега гл.ас.) в лаб. „Структурен органичен анализ” при ИОХЦФ-БАН, където работи и до сега.

### 2. Научни трудове

Въз основа на направения преглед на представените и много добре систематизирани, материали по конкурса мога да направя следните заключения за наукометричните показатели :

- научни публикации в списания с импакт фактор – общ брой **41**, като **32** от публикации са след защита на дисертацията за ОНС „доктор“ и **9** публикации са включени в нея

Много синтезирано е представена информацията за публикационната активност , импакт фактора и цитатите : *Z. Krist. NCS (0.118, 4); Acta. Cryst. E (0.347, 3); Bulg. Chem. Commun. (0.320, 4); Acta Chim. Slov., (1.135, 1); Monatsh. Chem. (IF: 1.347, 1); Comp. Theor. Chem. (1.368, 1); J. Mol. Struct. (1.599, 4); Chem. Phys. (2.028, 2); Molecules (IF: 2.095, 1); Food Chem. Toxicol. (IF: 2.610, 3); J. Mol. Catal. B – Enzym. (IF: 2.745, 1); Eur. J. Med. Chem. (IF: 3.432, 1); Amino acids (IF: 3.653, 1); Adv. Funct. Mater. (10.4, 1).*

- научни публикации в печатни издания без с импакт фактор – **2**
- издания от доклади на конгреси – **1**.

- Забелязани общо **110** цитата на **24** от научните трудове: **32** цитата на публикации в дисертацията за ОНС „доктор“ и **78** – на публикации извън дисертацията
- брой проекти –национални и международни -8
- брой участия в научни конференции - 22

Анализът на трудовете показва, че в трудовете отразяващи дисертацията, първи автор е научния ръководител проф. Цонко Колев, вместо дисертанта и тази подредба на авторите продължава и след това. Деница Панталеева има 1 самостоятелна публикация (*Bulg.Chem. Commun.*(2013) и само в 2 е първи и кореспондиращ автор. Не се съмнявам в личния принос и активности на Д. Панталеева в публикуваните трудове, но бих препоръчала в бъдеще да се стреми да има по-ясно изразена водеща роля в публикациите.

Основните научни интереси и получените резултати от гл.ас. Панталеева са насочени основно в 3 направления:

Синтез, спектрални свойства и структурното охарактеризиране на нови органични съединения, като нови материали за нелинейната оптика(НЛО) с потенциално приложение в телекомуникацията, оптичните компютърни технологии и оптичното съхранение на данни. Основните усилия са фокусирани към дизайн на нови материали подходящи не само за генериране на втора хармонична вълна, но и с НЛО свойства от по-висок порядък. Публикациите 1-13 са естествено продължение на дисертацията и включват дизайн и синтез на циклобутендиони и заместените циклобутендиони, съдържащи пиридинов фрагмент, условно означени като пиридинио-бетаини (4-диметиламино, 3-бензоил и 4- бензоилпиридинио-бетаини и др.) на квадратната киселина. Изследването на ефекта на молекулната конфигурация върху линейните и нелинейните оптични свойства е разширено и с електро-оптични абсорбционни измервания и квантово-химични подходи.

В публикациите с номера 14, 15, 17-20, 22-26 и 29 се разглежда дизайна и синтеза на нови биологично активни молекули (циклодидепсипептиди) с потенциално приложение в биомедицината. Основно са изследвани най-простите циклични депсипептиди 3- и 6- заместените 1,4-морфолин-2,5-дионов производни. Структурата на синтезираните съединения е охарактеризирана с експериментални (ИЧ и ЯМР спектрални) и теоретични (DFT, молекулнен докинг и др.) изследвания. За първи път е установено инхибиторното действие на 1,4-морфолин-2,5-дионите върху ензима ксантинооксидаза (ХО). При изследване на инхибиторна активност на 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 спрямо търговски ензим ХО, е установено и противовъзпалително действие. Тези резултати инициират провеждането на серия биологични тествания за антиоксидатно, антимикуробно и имуномодулаторно действие спрямо ксантинооксидаза.

Изследвани са група съединения – 2-амино-5-алкилидентиазол-4-они, като обещаващи инхибитори на липидното окисление. Проведените квантово-химичните пресмятания определят електронният пренос (SET) като най-вероятен механизъм на действие.

. Третата област на изследвания е свързана с приложение комбиниран подход съчетаващ квантово-химично изчисления, ИЧ спектрални и структурни изследвания на синтезираните нови съединения. Комбинирането на експериментални ИЧ данни и теоретични (B3LYP) пресмятания позволява да бъде проследено образуването на метоксидни и цианидни адукти на 2-[5,5-диметил-3-(2-фенил-винил)циклохекс-2-енилиден]-малононитрила и на техните последващи изомеризации. Установено е, че превръщането на неутралната молекула в адукти не е съпроводено със съществени промени в общата форма на изследваните съединения. Все пак най-големи промени се наблюдават при атомите, които променят конфигурацията си от тетрагонална ( $sp^2$ ) в тетраедрична ( $sp^3$ ). За охарактеризиране на структурата и вибрационните спектри на заместени бензофенони и техните анион-радикали ,(кетили) са приложени квантовохимични пресмятания (B1LYP, B3LYP, BHandLYP, и cam-B3LYP) с и без отчитане ефекта на разтворителя. Установено е добро съответствие между теоретичните и експериментални данни.

Гл. ас. Д. Панталеева е била ръководител на 2 младежки проекта с Фонд „Научни изследвания” - “Стереоселективен синтез и охарактеризиране на циклични депсипептиди” 2009-2010 г и ”Синтез и биологична активност на циклодидеспсипептиди”, 2012-2014 г и на 1 проект по програма „Развитие на научния потенциал” - стипендии за млади български учени:

Активно е участвала както член на колектива на 6 успешни проекти, финансирани от национални и чуждестранни фондове (Германия).

### **Преподавателска дейност**

Гл ас. Д. Панталеева била ръководител на **1 дипломна работа** за придобиване на образователно-квалификационна степен „магистър”, ХТМУ, 2012 г.

Участвала е като ръководител по програма Ръководство на стажанти – студентска практика „Анализ на храни и хранителни добавки чрез ИЧ спектроскопия” на **10 студенти** от Факултет по химия и фармация на СУ”Св. Кл. Охридски”, специалност „Екохимия”, „Инженерна химия и съвременни материали” и ХТМУ „Фин органичен синтез”.

На активното и отговорно ръководно отношение на Д. Панталеева се дължи дългогодишното (2004-2007 и 2013) успешно провеждане на **международни летни школи по инструментални методи за анализ към Центъра за приложна спектроскопия**. Обучени са средно по 15-20 студенти , докторанти и млади учени от Македония, Сърбия , Словения и България. Имам лични впечатления от провежданите школи и споделям високата оценка за работата Д. Панталеева дадена от международните координатори.

### **Заклучение**

Анализът на представените материали от гл.ас. Деница Панталеева показва, че те отговарят по обем и качество както националните критерии за заемане на

академична длъжност „ Доцент” така и специфичните изисквания на правилника на ИОХЦФ-БАН. Деница Панталеева е обещаващ изследовател, който може самостоятелно да ръководи и развива тематика в областта на органичната химия свързана със спектралното и структурното охарактеризиране на нови органични съединения с потенциално приложение като нови материали за нелинейната оптика, както и при дизайна и синтеза на нови биологично активни молекули за биомедицината.

Въз основа на всичко това си позволявам убедено да препоръчам на членовете на уважаемото жури по конкурса да гласуват за избирането на гл.ас.д-р Деница Панталеева за заемане на академична длъжност „ Доцент”.

13.03.2015 г., София,

/Доц. д-р Иванка Стойнева/