

СТАНОВИЩЕ

на акад. Иван Юхновски

относно: кандидатурата на гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева в конкурса за доцент по направление 4.2. Химически науки, научна специалност "Органична химия" за нуждите на лаборатория "Структурен органичен анализ" в ИОХЦФ-БАН

Гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева е представила за конкурса 32 научни труда извън тези в дисертацията ѝ за ОНС доктор, които са 9. Включените в конкурса научни трудове са публикувани (без два от тях) в списания с импакт-фактор. По трудовете на д-р Д. Панталеева са забелязани общо 110 цитата, от които 78 са по трудовете представени за конкурса.

Представените статии съответстват напълно на обявената тема на конкурса. Изследванията на д-р Д. Панталеева могат да се групират в три направления. Първото от тях включва синтезите, структурните и спектрални изследвания на органични съединения с евентуално приложение в нелинейната оптика. Тук следва да се отбележат изследванията на производните на квадратната киселина и охарактеризирането им с квантовохимични пресмятания, както и комплексни изследвания на вибрационните им и електронно- абсорбционни спектри.

Установено е, че редица от изследваните съединения имат добри или оптимални свойства за реалното им използване.

В направлението дизайн, синтез и охарактеризиране на фармакологично интересни съединения, наред с разработване на условията за синтезите им са разгледани техните ИЧ и ЯМР спектри. Подробно са изследвани електронната и пространствената им структура. Методите на молекулното моделиране са използвани за изследване на механизма на антиоксидантното им действие. Тези изследвания основно са насочени към проучване на много интересната и перспективна група от циклични дидепсипептиди. Синтетично са получени няколко съединения от този клас, които в началото на изследванията са открити в една патогенна гъбичка. Тези продукти подробно са изследвани с помоща на квантовохимични и спектрални методи.

В последствие са синтезирани и други аналози от изследваните съединения и са подложени на подробни фармакологични и биологични изследвания. Установена е тяхната антимикробна активност, имуномодулаторен ефект, противовъзпалително

действие и антиоксидантни свойства. Намерени са данни, че при 2-амино-5-алкилидентиазол-4-оните електронният пренос е най-вероятният механизъм за действието им като инхибитори на окислението на липидите.

В групата изследванията по органичните аниони, дианиони и радикали се включват квантовохимичните изследвания на изомерните динитробензоли, на метоксидните и цианидни адукти на спрегнати системи, производни на малононитрила, на структурата и вибрационните спектри на заместени бензофенони и техните анион-радикали.

Намерени са редица корелации между честотите на анион-радикалите и квантовохимичните параметри, характеризиращи разпределението на допълнителния електрон. Установено е, че отчитането на ефекта на разтворителя е от съществено значение за правилното предвиждане на честотите при квантовохимичните пресмятания.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ:

Д-р Деница Панталеева, кандидат за конкурса за доцент по органична химия, се представя с научна продукция напълно удовлетворяваща изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България за количество, цитируемост и качество. Макар и насочени в три доста различни области на органичната химия, нейните изследвания са обединени от много високата ѝ компетентност в съвременните методи за молекулни пресмятания, молекулна спектроскопия и молекулен дизайн.

Поради гореизказаното препоръчвам гл. ас. д-р Деница Янчева Панталеева да бъде избрана за доцент по научната специалност "Органична химия" в Института по органична химия с ЦФ при БАН.

Член на научно жури:

16.03.2015 г.

.....
/акад. Ив. Юхновски/