

## СТАНОВИЩЕ

### по конкурс за професор специалност 4.2.Химически науки (Теоретична химия)

към Институт по обща и неорганична химия на Българска академия на науките  
(ИОНХ-БАН)

обявен в ДВ, бр. 53 от 18.06.2013 г.

Кандидат: доц. д-р Наташа Средкова Трендафилова (ИОНХ-БАН)

Член на научно жури: проф. д-р Радостина Константинова Стоянова (ИОНХ-БАН)

#### **А. Обща характеристика на научно-изследователската и преподавателска дейност на кандидата**

В конкурса за професор по теоретична химия доц. д-р Наташа Трендафилова участва с 53 научни труда, посветени на изследване на електронната и геометрична структура на метал-органични комплекси и техните спектроскопски и молекулни свойства чрез използване на съвременни изчислителни подходи. От тях 51 са отпечатани в едни от най-реномираните в тази област международни списания като Journal of Physical Chemistry A, Chemical Physics, Spectrochimica Acta Part A, Inorganic Chemistry и др. Част от получените резултати са били представени на общо 56 научни форума, като 22 под формата на устни доклада. За успешното развитие на научно-изследователската дейност на д-р Трендафилова спомага активното ѝ участие в проекти с различни източници на финансиране: 9 международни и 11 национални, като на 3 от тях към Фонд за научни изследвания е била ръководител. Върху научните ѝ трудове досега са забелязани 451 независими цитати (основно в международната литература) с *h*-фактор 11. При това, 60 % от цитиранията са върху работи публикувани след 2005 г, което подсказва, че отзвукът върху изследванията на д-р Трендафилова ще се разшири значително след датата на конкурса.

Заедно с научно-изследователската дейност заслужава да се отбележи и активното участие на д-р Трендафилова в учебно-преподавателската дейност на Химическия факултет на ПУ „П. Хилендарски” и на ИОНХ-БАН. Тя е водила лекции и упражнения на студенти по дисциплините „Химия на координационните съединения” и „Компютърна химия” в рамките на учебните планове на специалност „Химия” – редовно и задочно обучение. Тези учебни дисциплини покриват изцяло темата на обявения конкурс. Под нейно ръководство двама редовни докторанти на ИОНХ-БАН са защитили успешно дисертации.

В заключение, анализът на предоставените документи за изследователска и преподавателска дейност показва ясно водещата роля на д-р Трендафилова както при определяне на научната тематика, така и при ръководене на цялостния научен процес. Не на последно място, като дългогодишен ръководител на лаборатория „Теоретична и изчислителна химия” към ИОНХ-БАН д-р Трендафилова има принос и за утвърждаването на тази тема в Института.

## **Б. Основни научни приноси**

Рационалният подход за създаване на нови и по-ефективни материали с определено предназначение е тясно свързан с въвеждането и усъвършенстването на оригинални теоретични и изчислителни методики за анализ на свойствата на веществата на атомно и молекулно ниво. В тази съвременна област на химическите науки могат да се причислят изследванията на д-р Трендафилова. Основната тематика е фокусирана върху приложението на специфични теоретични и изчислителни подходи при изучаване на хибридни органични-неорганични системи. Научните приноси могат да се обособят в три основни групи: (а) получаване на нови данни за електронната и геометрична структура на 3d и 4f метални комплекси и тяхната взаимовръзка със спектроскопски и молекулни свойства; (б) подбор на изчислителни техники за молекулно моделиране; (в) предсказване на нови свойства и реактивоспособност на молекулни комплекси. Всички тези приноси се разкриват най-ярко при молекулното моделиране на координационни съединения на 3d и 4f метали с биологично активни лиганди производни на кумарина, глиоксиловата киселина, фосфиноксиди, трифенилгуанидини, етилендиамин и дитиокарбамати. Поради спецификата на всяка една от изследваните системите са използвани широк спектър от изчислителни подходи базирани на класически и квантово-химични методи: молекулна механика, разширен метод на Хюкел, *ab initio* методи, теорията на електронната плътност, време-зависима теория на плътността и теория на електронната плътност с отчитане на периодичността. Изведените корелации между електронната структура, оптични и адсорбционни свойства дават възможност с достатъчна достоверност да се симулират фотофизични явления в разтвор, да се насочи синтеза на метални комплекси с желани оптични свойства, да се вникне в механизма на каталитична редукция на NO до N<sub>2</sub>. В този смисъл, изследванията на д-р Трендафилова имат пряко отношение към приложението на теоретичната и изчислителна химия при изследване на хибридни органични-неорганични системи, което определя добрите им перспективи за развитие в рамките на основната тематика на ИОНХ-БАН, а именно „химия на материалите”.

## **В. Заключение**

Отличителна черта на цялостната научна и преподавателска дейност на доц. д-р Наташа Трендафилова е системното и целенасочено прилагане на теоретични и изчислителни подходи за анализ на структурата и свойствата на комплексни метал-органични системи. Тези характеристики определят д-р Трендафилова като един от изявените български учени в областта на теоретичната и изчислителна химия. Всичко това ми дава основание да предложа най-убедено на Научното жури да присъди на доц. д-р Наташа Трендафилова академичната длъжност „професор” по теоретична химия.

18.10.2013 г.

Радостина Стоянова