

СТАНОВИЩЕ

по конкурс за **Професор**

Професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия)

обявен в ДВ бр. 53 / 18.06.2013 г.

за нуждите на Лаборатория «Теоретична и изчислителна химия», ИОНХ, БАН

Рецензент: проф. д-хн Соня Илиева, Факултет по химия и фармация, СУ «Св. Климент Охридски»

Кандидат в конкурса: доц. д-р Наташа Средкова Трендафилова, Лаборатория ТИХ, ИОНХ, БАН

Доц. Наташа Трендафилова е завършила висшето си образование в Софийски университет, Химически факултет през 1972 г. като Магистър със специалност Химик-неорганик. Същата година постъпва на работа в ИОНХ като от 1992 г. заема длъжност ст.н.с. II ст./доцент в института. През 1984 г. е защитила докторска дисертация на тема «*Молекулна и електронна структура на някои трис-хелатни комплекси с бидентатни лиганди*», изработена в ИОНХ, БАН.

Кандидатурата на доц. Н. Трендафилова **отговаря и надхвърля** изискванията съгласно ЗРАСРБ и респективните Правилници за прилагането му.

За участие в конкурса е представена следната **научна продукция: 53 научни статии (451 цитата)**, публикувани в утвърдени международни научни списания с IF. Общият брой публикации на доц. Трендафилова е 77, с 491 забелязани цитати в научната литература. Високата цитируемост на публикациите е доказателство за нивото и актуалността на разработките. Освен автор на публикации в реномирани научни списания, тя е и рецензент на статии, предложени за печат в тези издания – *J. Phys. Chem. A, J. Mol. Struct., Vibr. Spectr.* и др. Резултатите от научните ѝ изследвания са представени на редица (56) научни форуми у нас и в чужбина като доклади и постери.

Научно-изследователската работа на Н. Трендафилова е посветена на изучаване молекулната и електронна структура и спектралните характеристики на координационни съединения чрез приложение на квантово-химични изчисления и спектроскопски експерименти. В представената подробна справка за приносния характер на трудовете са очертани основните типове метални комплекси - предмет на изследователска работа. Обект на проучванията са метални комплекси с приложно значение за медицината, агрохимията и др. Голяма част от тях са нови и изясняването на структурата им, пряко свързана с техните физикохимични характеристики, е от непосредствено значение за приложимостта им в практиката.

Бих отбелязала следните акценти в научно изследователската работа на доц. Н. Трендафилова:

- В изследванията си доц. Трендафилова прилага най-съвременни нива на теоретични изчисления – TDDFT, MP2, CCSD(T), CC с цел изясняване на геометричната и електронна структура на металните комплекси, охарактеризиране на специфични молекулни свойства, предсказване на координационната способност и силата на метал-лигандните взаимодействия. Моделирането на метални комплекси не е тривиална теоретична задача и надеждното охарактеризиране на такива системи зависи до голяма степен от уменията на изследователя от една страна при подбора на теоретични методи и от друга - при правилния анализ на получените резултати.

- Изчисленията са проведени при отчитане на експлицитното и глобално (като среда) влияние на разтворителя. За отчитане влиянието на средата при симулиране на абсорбционни спектри е приложен иновативен изчислителен подход, включващ ефектите на солватация в метода DFT, който осигурява по-правилно определяне на фотофизичните характеристики.

- Проведени са теоретични изчисления за охарактеризиране на геометрична и електронна структура на комплекси и лиганди както в основно, така и във възбудено състояние. При сравнителен анализ на теоретичните резултати и експерименталните спектри (UV, FI, IR, Raman, NMR) са изведени зависимости, които могат да се прилагат за предсказване на молекулни характеристики и моделиране на комплекси с желани свойства.

- Теоретичните разработки са комбинирани и в този смисъл валидирани чрез провеждане на спектрални експерименти. Трябва да се подчертае, че в много случаи теоретичната химия допринася за получаване на недостъпна по експериментален път информация. Смятам, че основна характерна черта на изследователската работа на доц. Трендафилова е съчетаното приложение на теоретични изследвания на високо съвременно научно ниво върху значими за живите организми и практиката обекти, и прецизен спектрален експеримент.

- Като имам предвид разнообразието на изследваните комплекси по отношение както на метала, така и на лигандите и публикуваните в реномирани международни научни списания резултати, смятам, че доц. Трендафилова е утвърден изследовател в областта на моделирането и охарактеризирането на координационни съединения.

Научноизследователската работа на доц. Н. Трендафилова е в сътрудничество с колеги от БАН, СУ, МУ и международни партньори, което е отразено в съвместни публикации и участие в колективи по проекти: 9 международни научни проекти и 11 договора, финансирани от ФНИ, на 3 от които е ръководител. В работата си доц. Трендафилова е установила трайно и ползотворно сътрудничество с групата на проф. Бауер, Технически университет, Виена.

Преподавателската дейност на доц. Н. Трендафилова е свързана с нейната научно-изследователска работа. Водила е лекции, семинари и упражнения към курс по Компютърна химия в ПУ «П. Хилендарски», лекции по Химия на координационните съединения в ПУ, участвала е в центъра за обучение на БАН, водила е упражнения по Неорганична химия в ХФ на СУ. Под нейно ръководство успешно са защитили дисертация двама докторанти по научна специалност Теоретична химия и Неорганична химия.

В заключение: Въз основа на представените за конкурса материали, високото научно ниво на изследователска работа, получените резултати, които представляват определено научно постижение, както и моето лично мнение за кандидата като високоерудиран учен, убедено давам своята **положителна оценка** и предлагам **доц. Наташа Средкова Трендафилова** да бъде избрана за **ПРОФЕСОР в ИОНХ-БАН**.

30.09.2013 г.

проф. дхн Соня Илиева