

## Р е ц е н з и я

от проф. д-р **Аля Витали Таджер**, член на научното жури  
по конкурс за **професор** обявен в ДВ бр. 53 от 18.06.2013 г. в професионално  
направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия)  
за нуждите на Лаборатория “Теоретична и изчислителна химия” при ИОНХ-БАН  
с единствен кандидат **Наташа Средкова Трендафилова**, д-р, доцент

**Кратка биографична справка за кандидата:** доц. д-р Трендафилова е възпитаник на Химическия факултет при СУ, където се дипломира като магистър по неорганична химия през 1972 г. Целият ѝ трудов стаж е протекъл в Института по обща и неорганична химия при БАН: още същата година е назначен като химик; през 1981 г. става научен сътрудник III ст. Защитава дисертация през 1984 г. и е избрана за научен сътрудник I ст. през 1985 г. Хабилитира се през 1992 г. като старши научен сътрудник II ст., приравнен с доцент съгласно ЗРАСРБ през 2010 г. Междувременно в периода 1984-1992 г. специализира в Техническият университет във Виена, Австрия (1984, 1986, 1988, 1992 г.) и в Университета на Регенсбург, Германия (1992 г.). Била е председател на ОС на Института, а от 2008 г. до момента е председател на Научния съвет на ИОНХ-БАН. Има опит като преподавател и научен ръководител, както и като член и ръководител на проекти и договори.

### **Анализ на представените материали по конкурса**

#### ***Научни статии***

За участие в конкурса, доц. Трендафилова представя 53 от общо 77 публикувани научни труда. В това число влизат две публикации от 1984 г., които са от период преди хабилитацията като старши научен сътрудник II ст. и вече са били обект на рецензиране; поради което ще ги изключат от рецензията. Това не променя осезаемо наукометричните параметри на кандидата: броят на статиите остава над 50, цитатите – значително над 350 и h-факторът – 11. Всички публикации за конкурса са на английски език.

49 от тези 51 са в реферирани издания (ISI, Scopus). Кандидатът е представил списък на импакт-фактори на списанията, в които са публикувани трудовете, но това са данни за 2012 г., докато статиите обхващат 20-годишния период 1993-2013 г. Съгласно

посочените стойности общият импакт фактор е 101.4 на фона на 121.8 за цялото научно творчество, което свидетелства, че в конкурса са представени най-значителните работи на кандидата.

Статиите са в списания като Chemical Physics (8), Spectrochimica Acta (6), JPC A (4), Vibrational Spectroscopy (4), Inorganica Chimica Acta (3) Journal of Molecular Structure (3), Journal of Raman Spectroscopy (2), Inorganic Chemistry (2), Journal of Organometallic Chemistry (2), Journal of Molecular Modeling (2), Monatshefte für Chemie (2), Journal of Trace Elements in Medicine and Biology (2) и по 1 статия в още 9 други списания, сред които смятам за особен успех тази в Journal of Chemical Physics. Намирам за много положителен факта, че кандидатът публикува в разнообразни издания – това от една страна показва тематично разнообразие и е гаранция, че всяка статия е намерила своя правилен адрес и аудитория, а от друга – показва авторска смелост. Редно е да се спомене, че част от тези списания, макар да нямат много висок импакт фактор, имат много високи изисквания и висок процент на отхвърляне. Публикациите на кандидата са общо взето равномерно разпределени през годините.

Доц. Трендафилова е първи автор в 12 от тези 51 публикации, единствен автор за кореспонденция в 10 и един от двамата посочени кореспонденти в 3 от останалите, старши изследовател в 2 без посочен кореспондент. Следователно в повече от половината публикации кандидатът е водещият изследовател. Авторските състави варират по афилиация (предимно университети и институти от България, Австрия, Германия) и численост (6 с 2-ма, 10 с 3-ма, 14 с 4-ма, 10 с 5-ма, 9 с 6-ма, 2 със 7 и 1 с 11 автори). Почти неизменният съавтор е Ивелина Георгиева (38), следвана от Günther Bauer (17), Ирена Костова (14), Цветан Михайлов (9), Георги Николов (7), Николай Додов (5), Wolfgang Kiefer (5), Hans Lischka (5) Adelia Aquino (4) и др. Сред българските съавтори има колеги от различни институти на БАН, Софийския, Пловдивския, Медицинския, Минно-геоложкия и други университети, което от една страна е доказателство за широки научни контакти, а от друга – за високия авторитет на кандидата, тъй като с изключение на лично обучените докторанти, българските съавтори в почти всички случаи са експериментатори, които са потърсили сътрудничество с експерт в молекулярното моделиране и интерпретация на спектри.

Забелязаните допреди 3 месеца 373 цитата са върху общо 50 от публикациите (от общо около 500 за цялостното творчество) на кандидата. Само една статия още не е цитирана нито веднъж. Това означава средна цитируемост около 7.5, което показва, че повечето от научните съобщения на д-р Трендафилова са привлекли значително читателско внимание. Отбелязан е h-фактор **11**.

### ***Участия в национални и международни конференции с доклади и постерни съобщения***

В документите си доц. Трендафилова е включила информация за научните форуми, в които е участвала от началото на научната си кариера. Ще се спра само на тези след хабилитацията ѝ. Доц. Трендафилова е съавтор на голям брой устни презентации изнесени на международни (18) и национални (8) конференции, както и на постерни доклади, показани у нас (2) и в чужбина (22). Тези 50 участия са свидетелство за активна популяризаторска дейност.

### ***Научни направления***

Подбраните за конкурса публикации отразяват изследванията на д-р Трендафилова през последните 20 години в област, в която е постигнала значителни успехи. В цялостната ѝ научна продукция съвсем ясно се може да се дефинира тематика, в която тя израства още от докторант и в посочените публикации е вече водещ изследовател поне в частта на молекулулното моделиране и симулации на спектри.

**Обекти на изследване** са координационни съединения на nd- и 4f- метали с моно- и/или полидентатни лиганди. Лантанидните йони са със заряд 3+, а d-елементите са предимно йони със заряд 2+. Лигандите са главно органични молекули, заемащи една до три координационни позиции. Част от комплексите са вече синтезирани и целта на изследването е била изясняване на електронната структура и дешифриране на спектралните им характеристики; друга част са моделирани и прогнозирани по отношение на същите характеристики. Макар отделни публикации да имат по-скоро методичен характер, изследването в никой случай не е било самоцелно – изучаваните или моделирани системи са с пряко приложение. Най-голямата група изследвани комплекси са с доказано или прогнозирано приложение в фармацията/медицината, но има и такива с приложение като сензори, луминофори, катализатори, феромагнити и др. Това прави изследванията на д-р Трендафилова особено актуални.

**Изследвани свойства и явления:** За всички изследвани обекти е изучена пространствената и електронна структура. Оптимизирана е геометрията в основно, а в някои случаи и във възбудено състояние. Правени са симулации в газова фаза, където е целесъобразно в периодични условия или с отчитане на имплицитен разтворител и присъствие на единични експлицитни молекули от средата. Анализирани са разпределенията на електронната плътност. Направена е количествена оценка на енергетичните характеристики и различните приноси към тях. Изяснен е типът и характерът на връзките. Спектралните свойства, които са предсказани или

възпроизведени, са вибрационните инфрачервени и Раманови спектри (почти за всички системи), електронните абсорбционни и в някои случаи емисионни спектри и в две работи – ЯМР спектри. Установени са поляризационни, солволитични, солватохромни и йнохромни ефекти. Лигандите често са симулирани и самостоятелно, за да могат да се оценят промените, настъпващи при формирането на комплекси.

**Използвани методи и софтуер:** В своята работа д-р Трендафилова използва голямо разнообразие от методи, които еволюират паралелно с развитието на изчислителната техника и програмните продукти. На всеки етап са използвани най-точните методи, които са били технически достъпни. Методичният арсенал включва класически (молекулно-механични), емпирични (ЕНМО) и *ab initio* методи използващи вълнови функции (HF, MPx, CC2, CCSD(T)) и такива базирани на електронната плътност (DFT, periodic DFT); релативистичните ефекти са третиранни в приближението от нулев порядък (ZORA), а за симулация на спектри са включени GIAO и TDDFT методите. Наред с многообразието на методи са използвани и най-различни атомни базиси – от плоски вълни до TZVPP, базиси на Pople с допълнителни дифузни функции, GGA, m-GGA и хибридни функционали. Включени са и различни модели на имплицитен разтворител – PCM, COSMO. Приложени са някои нестандартни изчислителни схеми (NCA, NPA, AIM, CDA, EPA). Използвани са почти всички най-утвърдени програмни пакети за пресмятане с методи базирани на първите принципи: Gaussian, Turbomole, ADF, VASP. Владеенето на целия този инструментариум е много впечатляващо.

**Резултатите** са многократно цитирани и то от видни специалисти в най-реномирани научни журналы и едва ли се нуждаят от допълнително рецензиране. Трябва да се подчертае, че начинът на представяне на данните, критичният анализ и обобщенията на получените резултати изложени в представените публикации показват, че д-р Трендафилова е учен със задълбочени знания и разнообразни компетентности.

### ***Научни приноси***

Може да се каже, че почти всички изследвания на д-р Трендафилова са в областта на молекулното моделиране на чисто органични или хибридни системи. Молекулното моделиране е извършено добросъвестно с подходящи методи и е съпроводено с изчерпателен анализ. Използвани са неемпирични и полуемпирични квантово-химични методи. Пресмятанията са направени във вакуум и в имплицитно зададена среда симулираща обкръжение с различна степен на хидратираност.

Научните приноси са обобщени от кандидата в 'Авторска справка', която е написана изключително ясно и стегнато и отразява адекватно съдържанието и приносния характер на представените изследвания. Доц. Трендафилова е групирала публикациите си в 4 раздела, които определено нямат еднаква тежест. В първия раздел влизат систематичните изследвания върху биоактивни лиганди и техните комплекси с йони на d-/f-елементи, които са същината на научната ѝ работа. Останалите 3 раздела включват общо 6 работи посветени на координационни съединения с други приложения. От моя гледна точка най-съществени приноси са:

1. Предсказани и потвърдени са начините на координиране на кумаринови лиганди към различни групи от йони, изчислени са спектралните характеристики и са определени характерът на връзката, приносите към нея от енергетично и зарядово естество и е намерена корелация между параметри на връзката и луминесцентния квантов добив при лантанидните комплекси. Наред с ценни резултати за практиката, тази група от изследвания включват нестандартни изчислителни техники и изработването на изчислителен протокол представлява самостоятелен принос.

2. В подкрепа и допълнение на експериментални изследвания са направени теоретични симулации на структура и вибрационни характеристики на комплекси на редица двузарядни йони на d-елементите Cu(II), Zn(II), Ni(II) Co(II), Cd(II), Pt(II) и Pd(II) с различни лиганди, част от които са биологично значими или аналози на такива: глиоксими, фосфиноксиди, трифенилгуанидини, дитиокарбамати, диетилентриамин. Установени са лигиращите центрове и начина на координиране на лигандите, възникването на Ян-Телерови деформации при координиране и промени в разтвор и/или при опаковане в твърда фаза. Тези изследвания имат важно значение, защото изучаваните обекти намират конкретни медицински (ензимология и фармация), индустриални (катализ) и агрохимични приложения.

3. Сред комплексите на гореизброените d-елементи особено внимание е отредено на производни на цисплатина и един самостоятелен принос е изследването на механизма на хидролизата им (посредством Теорията на преходното състояние) и изясняване на факторите, които влияят върху термодинамичната стабилност на комплексите. Резултатите са подкрепени с клинични изследвания, а намерената връзка между теоретично определените характеристики и регистрираната противотуморна активност могат да послужат за молекулен дизайн на нови карциногенни препарати.

4. Един принос, който според мен тепърва ще срещне признание, е адекватното теоретично моделиране на солватохромен и йонохромен ефект при координационни съединения с приложение като оптични сензори.

5. Принос в по-новите изследвания на кандидата е изясняването по теоретичен път на структурата и свойствата на дотирани периодични структури с директно практическо приложение като катализатори или мултифероични структури.

В обобщение бих казала, че приносите в публикациите на д-р Трендафилова имат методичен и приложен характер, разширяват и обогатяват съществуващи знания с нови факти и нови средства, оборват съществуващи и предлагат и доказват нови хипотези.

### ***Експертна дейност***

Допълнителна висока оценка на експертните знания на доц. Трендафилова представлява привличането и като рецензент от страна на реномирани специализирани научни издания като: Journal of Molecular Structure, Spectrochimica Acta, Vibrational Spectroscopy, Journal of Physical Chemistry A и др. Наред с това тя е търсен специалист при научни обсъждания и апробации на дисертации. Беше член на СНС по Теоретична химия към ВАК. През последните години е била член на многобройни журита по процедури в съответствие със ЗРАСРБ, в които е изготвяла компетентни рецензии и становища.

### ***Проекти***

Д-р Трендафилова активно участва в проектното финансиране. През периода 1992-2012 тя е ръководител на 3 и участник в 7 проекта финансирани от НФНИ. Спечелва и ръководи първия си проект непосредствено след хабилитацията. 3 от проектите, в които участва са със значително финансиране и колективно управление и в тях кандидатът е член на Управителен съвет или ръководител на работен пакет. В спечелените проекти от тематичните конкурси на МОН и на Медицинския университет доц. Трендафилова отговаря за реализацията на теоретичните и спектралните изследвания. Същата роля ѝ е отредена в 7 от международните проекти, по които работи (6 от които са с Техническия университет във Виена и 1 с DFG), а на 2 проекта – един по линия на COST и един по 7-ма рамкова програма – е ръководител от българска страна.

Пожелавам на доц. Трендафилова да използва създадените научни контакти за успешно включване в нови научни проекти с международно участие, където условията и финансирането са ясно регламентирани и строго съблюдавани.

### ***Преподавателска дейност***

Кандидатът има опит като преподавател. След хабилитирането си през периода 1995-1999 г. доц. Трендафилова е водила лекциите и упражненията по *“Компютърна химия”* към Катедрата по физикохимия, и лекции по *“Химия на координационните съединения”* към Катедрата по неорганична химия за студентите от специалност *“Химия”* - редовно обучение в Пловдивския университет *“Паисий Хилендарски”*.

Изготвила е и две програми към Центъра за обучение към БАН по *“Изчислителни методи в материалознанието”* и *“Теоретична спектроскопия”*.

Под нейно ръководство са изработени и успешно защитени (2000 г. и 2009 г.) две дисертации за получаване на ОНС ‘доктор’.

Тези факти показват, че д-р Трендафилова е специалист с опит в преподаването и ръководството на студентското научно творчество.

### **Заключение**

В конкурса доц. д-р Наташа Трендафилова се представя с необходимия брой публикации и изследванията ѝ са в области значими за науката и практиката. Научните ѝ резултати са оригинални и намират значителен отзвук в специализираната литература. Оценка направена по-горе за научната и продукцията, популяризацията на резултатите, активно участие в научни проекти и преподавателската ѝ дейност ми дават основание с пълна увереност да предложа на уважаемото Научно жури да подкрепи избора ѝ за ПРОФЕСОР в направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).

18.10.2013 г.

Рецензент:

/А. Таджер/