

РЕЦЕНЗИЯ

от д-р Светлана Димитрова Симова, професор в ИОХЦФ-БАН

на материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност
‘професор’ в ИОХЦФ - БАН

в област на висше образование “4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление “4.2. Химически науки“, по научната специалност „Органична химия“

В конкурса за ‘професор’, обявен в Държавен вестник, бр. 79 от 07.10.2016 г. и в интернет-страницата на ИОХЦФ - БАН за нуждите на лаборатория „Център по ЯМР спектроскопия“ като единствен кандидат участва **доц. д-р Павлета Шестакова** от лаборатория „Център по ЯМР спектроскопия“

1. Общо представяне на получените материали

Със заповед № НО-05-05-23 от 13.12.2016 г. на Директора на ИОХЦФ-БАН съм определена за член на научното жури на конкурс за заемане на академичната длъжност **‘професор’ в ИОХЦФ-БАН** по област на висше образование “4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление “4.2. Химически науки“, по научната специалност „Органична химия“, **обявен за нуждите на лаборатория „Център по ЯМР спектроскопия“**

За участие в обявения конкурс е подал документи **единствен кандидат**:

доц. д-р Павлета Шестакова от ИОХЦФ-БАН

Представеният от **Павлета Шестакова** комплект материали на хартиен и електронен носител е в съответствие с Правилника за развитие на академичния състав на ИОХЦФ-БАН, и включва следните документи:

- Молба за участие в конкурса
- Професионална автобиография
- Копие от диплома за ОНС “доктор”
- Копие от диплома за академичната длъжност „доцент“
- Автореферат на защитен дисертационен труд за ОНС “доктор”
- Списък на публикациите
- Справка за научните приноси
- Списък на забелязаните в литературата цитати
- Справка за участие в научни проекти

- Списък на участия в научни форуми
- Справка за образователна дейност
- Справка за експертна дейност
- Справка за награди и отличия
- Копия на публикациите
- CD с документацията по конкурса

Д-р Павлета Шестакова е приложила общо 55 научни труда (разделени на принципа преди и след придобиване на академичната длъжност доцент) и една заявка за патент. В съответствие с ППЗРАСРБ приемам за рецензиране патентната заявка и 29 научни труда, публикувани в международни списания със среден IF = 3.9, цитирани общо 89 пъти, които са извън дисертацията и доцентурата. Не се рецензират представените отделно 26 научни труда, като следва да се отбележи общият брой от 462 цитирания и *h*-фактор 11, които са индикация за международна разпознаваемост и за прилагания интердисциплинарен подход при работата на кандидата по поставените цели. Представен е и списък с 4 публикации в национални списания, които не са включени за участие в конкурса, но имат няколко цитата. Представени са и изчерпателни справки за участия в научни проекти, в научни форуми, за образователна и експертна дейност, както и за награди и отличия, които отразяват цялостната дейност на кандидата по научната специалност.

Без колебание мога да кажа, че документацията представена от доц. Шестакова по конкурса е много добре оформена и съдържа необходимата информация.

2. Кратки биографични данни на кандидата

Доц. Шестакова е родена в гр. Айтос, България. Завършва висшето си образование в Химическия Факултет на СУ „Климент Охридски“ със специализация по органична и аналитична химия. Постъпва на работа в ИОХЦФ-БАН през 1988 г. като оператор на ЯМР спектрометър в лабораторията по ЯМР спектроскопия. Поради интереса си към научната работа успява след няколко години да тръгне към научна кариера като последователно заема академичните длъжности н.с. III – I степен, като през 2006 г. защитата на научната и образователна степен „доктор“. През този период отсъства няколко пъти поради майчинство и други семейни причини. През 2010 г. се хабилитира, а от 2012 г. заема длъжността зам.-директор на ИОХЦФ-БАН. Следва да се отбележи ползотворното сътрудничество с колеги от Университетите в Брюксел и Льовен, където тя в последните десет години значително повиши своята квалификация и извършва значителна част от научните изследвания, а в последните няколко години обучава студенти и докторанти.

3. Обща характеристика на дейността на кандидата

Основен акцент в изследванията на д-р Шестакова са ЯМР-методите за установяване на структура и динамика на молекулни системи на атомно ниво. При това тя извършва научни, научно-приложни, експертни и сервизни дейности върху разнообразни обекти в сътрудничество с учени от страната и чужбина. Въвежда за първи път в изследователската практика в лабораторията редица нови и актуални методи, не само у нас но и в няколко чуждестранни университета. Значителна е преподавателската ѝ дейност в ИОХЦФ, СУ, както и в Университетите в Брюксел и Льовен. Д-р Шестакова обучава значителен брой дипломанти, специализанти и докторанти, включително и по международни програми. Член е на работната група за подготовка на документацията и програмите на Изследователския университет на БАН (бакалавърска програма по „Химия“ и магистърска програма по „Материалознание“) и на Академичния съвет на БАН. Значително е участието ѝ при подготовката и изпълнението на много научно-изследователски проекти, финансирани от национални и международни фондове. Била е национален представител на страната в една COST акция. Признание за научната ѝ компетентност е включването ѝ като експерт към Европейската комисия по програмите Хоризонт 2020 и Седма рамкова програма (FP7-PEOPLE-2013-IEF-IF-IOF, H2020-MSCA-IF-2014, H2020-MSCA-IF-2015, H2020-MSCA-IF-2016). Участва в организирането на международни и национални научни мероприятия като конференции, работни срещи и обучителни мероприятия, като бих отбелязала от лични впечатления ангажираността и организаторските ѝ способности при провеждането на двете ЯМР конференции и срещи на потребителите на ЯМР спектрална апаратура на фирма Брукер през 2012 и 2016 г. През последните четири години умело председателства общоинститутския семинар на ИОХЦФ-БАН.

Оценка на научната и научно-приложна дейност на кандидата

Основно изискване за заемане на академичната длъжност ‚професор‘ в ИОХЦФ-БАН е кандидатите да имат ясно очертана тематика, в която да е водещ изследовател. Доц. Шестакова е изявен специалист с ясно очертан профил на научните и научно-приложните изследвания. Основните професионални компетентности могат да се формулират като:

- Въвеждане и утвърждаване на нови ЯМР методи (дифузионна ЯМР спектроскопия и ЯМР спектроскопия с въртене при магически ъгъл) в научната практика в България.
- Структура, размери и динамика на нано-размерни агрегати на базата на повърхностно-активни вещества и полимери (смесени мицели, липозоми, конюгати) с потенциално приложение като лекарство доставящи системи.
- Структура и морфология на нови материали на базата на полимерни хидрогелове, мезопорести материали и зеолити.
- Молекулна структура, динамика и взаимодействия на синтетични и природни биологично активни вещества.

- Качествен и количествен анализ на състава на сложни смеси представляващи екстракти от природни източници.
- Състав и структурни характеристики на хранителни емулсии.

Приноси (научни, научно-приложни, приложни) и цитирания

Научните приноси на д-р Шестакова могат да се обобщат в четирите основни научни направления на нейните научни интереси в последните години.

- Демонстрирани са възможностите на дифузионната ЯМР спектроскопия (публикации **1, 2, 5, 6, 14, 19, 20, 21, 22, 23, 25, 26**) за изследване на сложни многокомпонентни смеси и на сложни реакционни механизми, включително *in situ*, посредством ^1H и ^{31}P DOSY в комбинация с други ЯМР и теоретични методи при полимерни системи за доставка на лекарства, в химията на полиоксометалатите, за определяне на структурата, размерите и динамиката на надмолекулни нано-размерни агрегати в разтвори. Разработен е алтернативен метод за оценка на точността на математическите алгоритми за анализ на DOSY спектри и за определяне на дифузионните коефициенти на основата на генериране на електронен референтен сигнал. В някои от случаите DOSY се оказва единствен метод, подходящ за изследване на конкретните системи, а в повечето дифузионните експерименти позволяват определяне на размерите на различни по големина и форма структури и оценка на количественото им разпределение, с което допринасят за по-задълбоченото разбиране на протичащите процеси и планиране на тази основа на последващи теории и експерименти. Изследванията в тази сравнително нова научна област допринасят за утвърждаване на метода в химията въобще и особено за популяризиране на приложението му. Следва да се отбележи приноса на доц. Шестакова при инсталиране на нетрадиционното и капризно оборудване, както и за надеждната му употреба. Работите са намерили значимо цитиране в литературата и доц. Шестакова е един от признатите авторитети в тази област в Европа.

- ЯМР спектроскопията с въртене при магически ъгъл, макар и отдавна известен метод, е сред най-бързо развиващите се области на изследване в последните години. Принос за въвеждане на метода в изследователската практика в страната имат изследванията на доц. Шестакова, отразени в публикации **8, 9, 10, 11, 13, 16, 18** и **24**. Изследвани са както материали в твърда фаза, така и меки и микрохетерогенни материали с използването на различни атомни ядра ^1H , ^{13}C , ^{29}Si , ^{27}Al , ^{31}P и ^{119}Sn , като е установена детайлна информация за структурата и взаимодействията на молекулно ниво в изследваните обекти, в редица случаи допълвайки резултатите получени за изследваните материали с други аналитични методи. Със най-голям приносен характер на кандидата бих отбелязала изследванията на двойните полимерни мрежи (ДМ), в които посредством ЯМР методи е установено, че забележителната здравина на ДМ се

дължи на образуването на ковалентни връзки между двете мрежи чрез нереагирани двойни връзки, както и на образуването на мрежа от здрави водородни NH/CO връзки между страничните вериги на полимерите. Следва да се отбележат и надеждните резултати, получени посредством ЯМР спектроскопия при изследвания на мезопорести силикатни материали с приложение за ефективни лекарство-доставящи системи, които са добра основа за бъдещи постижения. Сравняване на ^{31}P и ^{119}Sn ЯМР спектри на координационни полимери със слоеста морфология в разтвор и твърда фаза показват наличие на динамично равновесие между няколко изомерни форми, при което преобладаващите изомери в разтвор и в твърда фаза са различни.

– Изследванията на кинетика и термодинамика на молекулни взаимодействия и молекулна динамика чрез ЯМР спектроскопия в разтвор е традиционна тематика в Центъра по ЯМР спектроскопия. Публикации **3** и **7** разширяват областите на приложение на методите до координационни нанокapsули и техни комплекси от типа „домакин-гост“ с кафеин и пирен в присъствие на глутатион, показвайки, че стабилността и реактивоспособността на метал-надмолекулярните капсули могат да бъдат модулирани чрез промяна на типа на координация метал или чрез включване на молекули-гости. Посредством ^1H и ^{31}P ЯМР спектроскопия (публикации **4,12** и **15**) е изучена кинетиката на хидролиза на фосфоестерни връзки в моделни ДНК/РНК субстрати в присъствие на различни Zr(IV)-заместени полиоксометалати, установявайки редица закономерности за изследваните процеси.

– Приносът на доц. Шестакова в публикации **17, 27** и **28** са главно нерутинни ЯМР изследвания и интерпретация на резултатите. Макар да не е водеща в тях, с участието си тя значително е допринесла за крайния резултат, особено при разработване на метода за количествен анализ на съдържанието на сескитерпенови лактони в екстракти от *Arnica Montana L.*. Следва да се отбележи, че по-голяма част от публикациите са резултат на участието на доц. Шестакова в много научни проекти с национално и международно финансиране, докладвани са на редица международни и национални конференции е международно участие като устни или постерни съобщения, както и че са получили многобройни национални и една международна награда.

Научно-приложна дейност

Доц. Шестакова е ръководител на четири успешно приключили научно-приложни проекта с фирми от страната и чужбина. Подадена е и заявка за патент на тема „Наноразмерни полиелектролитни асоциати, с противотуморно действие, метод за тяхното получаване и приложението им“. Тя участва заедно с всички колеги от лабораторията в сервизната дейност на Центъра по ЯМР спектроскопия.

4. Оценка на личния принос на кандидата

Личният принос на кандидата в описаните по-горе дейности и приноси е не само безспорен, но очевидно е водещ. Получените отлични резултати и обобщени приноси са резултат на подбор на перспективни сътрудничества, деликатно изясняване на ползата от приложението на ЯМР методите, значителна и прецизна експериментална работа, допринасяща за надеждно тълкуване на явленията и описание на структурата и свойствата на изследваните обекти. Приносите в част от резултатите са колективно дело, което следва да се приветства, тъй като добавената стойност е значителна, а високата компетентност на кандидата в редица проблеми е от първостепенно значение.

5. Критични забележки и препоръки

Нямам съществени критични бележки към кандидата. Бих препоръчала в близко бъдеще да обучи докторант от България в областите си на компетентност, което ще допринесе съществено както за развитието на съответните тематики, така и за бъдещото развитие на Центъра по ЯМР спектроскопия.

6. Лични впечатления

Познавам Павлета Шестакова от редица години. Пред очите ми от тих, скромн и малко страхлив колега се превърна в един от най-надеждните учени в нашия институт, притежаващ значителни научни приноси и познания, както и организационни умения и широк хоризонт на възгледите, необходими за отлична реализация както в научен, така и в административен аспект.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Документите и материалите, представени от доц. д-р Павлета Шестакова **отговарят на всички** изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и съответния Правилник на ИОХЦФ-БАН.

Кандидатът в конкурса е представил **значителен** брой научни трудове, публикувани след материалите, използвани при първата хабилитация. В работите на кандидата има оригинални научни и научно-приложни приноси, които са получили международно признание като преобладаващата част от тях са публикувани в списания, издадени от международни академични издателства. Теоретичните разработки имат практическа приложимост, като част от тях са пряко ориентирани към учебната работа. Научната и преподавателската квалификация на доц. д-р Павлета Шестакова **е несъмнена**.

Постигнатите от **доц. д-р Павлета Шестакова** резултати в научно-изследователската, научно-приложната и учебната дейност **значително надвишават** специфичните изисквания на ИОХЦФ-БАН, приети във връзка с Правилника на БАН и ИОХЦФ за приложение на ЗРАСРБ.

След запознаване с представените в конкурса материали и научни трудове, анализ на тяхната значимост и съдържащи се в тях научни и научно-приложни приноси, намирам за основателно да дам своята **положителна** оценка и да препоръчам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ за избор на

доц. д-р Павлета Шестакова

на академичната длъжност 'професор' в ИОХЦФ-БАН по професионално направление 4.2. „Химически науки“ по научната специалност „Органична химия“

17.02.2017 г.

Рецензент:

/проф. дхн Светлана Симова/