

СТАНОВИЩЕ

От проф. д-р, инж. Павлинка Александрова Долашка, ИОХЦФ – БАН, относно обявения конкурс за “Професор” по професионално направление “Органична химия”, шифър 01.05.03, за нуждите на Центъра по ЯМР спектроскопия, към Института по органична химия с Център по фитохимия, БАН

Обща част

Конкурсът за “Професор” по професионално направление “Органична химия”, шифър 01.05.03, за нуждите на Центъра по ЯМР спектроскопия, към ИОХЦФ-БАН е обявен на 07.10.2016 г. в брой 79 на ДВ. Единствен кандидат в конкурса е доц. д-р Павлета Стоянова Шестакова - служител в същия институт.

Прегледът на документите показва, че процедурата по разкриване и обявяване на конкурса е спазена и документите са подготвени съгласно изискванията на Закона за развитие на академичния състав в РБ и Правилника за неговото приложение.

През 1988 доц. Шестакова завършва Химически факултет, Софийски университет „Св. Климент Охридски“ със специалност органична и аналитична химия, а през 2006 г. защитава докторска дисертация в ИОХЦФ-БАН по научната специалност 01.05.03 „Органична химия“. За научното ѝ развитие е допринесло и многократното гостуване в периода 2006-2014 г. като изследовател в Католически университет в Льовен, Свободен университет Брюксел, Белгия и Университета Якобс, Бремен, Германия.

Научни трудове

В конкурса за „Професор“ доц. Шестакова участва с 55 научни труда с общ ИФ 161,21, които са цитирани в научната литература над 460 пъти. След придобиване на академичната длъжност „Доцент“, след 2010 г. тя участва в 29 статии, с общ ИФ 112.072. Някои от тях са публикувани в списания с висок ИФ, като *Biomacromolecules* – ИФ-5.583, *Chemistry – A European Journal* с ИФ 5.771, *Inorg. Chem.* ИФ- 4.820, *Chemistry an Asian Journal* ИФ-4.587, *J. Controlled Release* с ИФ-7.441 и др.. Тези статии са цитирани 89 пъти, като в 12 публикации доц. Шестакова е първи автор и/или автор за кореспонденция и в 9 публикации е втори автор. Доц. Шестакова е съавтор и на 1 патент. Висока оценка на научната ѝ дейност е H-index 11. Получените научни резултати са представени на 79 международни и национални научни конференции, като тя е докладвала резултатите на 23 международни научни форуми и е изнесла 8 лекции в чуждестранни университети и научни институции.

Приемам всички трудове на доц. Шестакова като свързани с темата на конкурса, като обект на рецензиране са само публикуваните статии след нейната хабилизация.

Научни резултати

Въпреки че всички подлежащи на рецензиране трудове са в областта на ЯМР спектроскопията, то постигнатите резултати тематично могат да бъдат обобщени в следните области:

- I. Дифузионна ЯМР спектроскопия за изследване на процеси на молекулно агрегиране, взаимодействия и структура на многокомпонентни сложни системи в течна фаза.
- II. ЯМР спектроскопията с въртене при магически ъгъл за изследване на полимери, полимерни хидрогелове, мезопорести силикати и зеолити.

III. Изследване на кинетика и термодинамика на молекулни взаимодействия и молекулна динамика чрез ЯМР спектроскопия в разтвор.

IV. Конформационен анализ и изследване на структурата на синтетични и природни продукти с потенциална биологична активност.

Някои от по-важните резултати се изразяват в следното:

1. Значими резултати са представени в 18 публикации от първия раздел, постигнати при прилагане на дифузионна ЯМР спектроскопия за изследване на процесите на молекулно агрегиране, взаимодействия и определена на структурата на многокомпонентни сложни системи в течна фаза. Постигнато е определяне на структурата, размери и динамика на надмолекулни нано-размерни агрегати в разтвори на повърхностно активни вещества и полимери.

2. На базата на разработен нов метод за оценка на точността на математическите алгоритми за анализ на спектрите, получени с количествена дифузионна ЯМР спектроскопия и за определяне на дифузионните коефициенти, са въведени и популяризираны възможностите на дифузионната ЯМР спектроскопия в България за охарактеризиране на наноструктурирани материали.

3. Впечатляващи и целенасочени са изследвания на доц. Шестакова върху охарактеризиране на различни вещества с потенциално практическо приложение. Разработени са полимерни системи за доставка на лекарства, като чрез подходящ набор от експериментални параметри и анализ на дифузионните профили в ЯМР спектрите, са определени размерите и разпределението на полимера в различни структури (липозоми, мицели, унимери).

4. Представените в 8 публикации резултати във второто направление доказват предимствата на ЯМР спектроскопията за характеризирани на полимерни хидрогелове, мезопорести материали и зеолити. За първи път в България са използвани HRMAS и ТФ-ЯМР за изследване на полимерни хидрогелове и характеризирани на лекарство-доставящи (ЛДС) системи на базата на мезопорести силикати и зеолити.

Използването на мезопорести силикатни материали е актуална съвременна стратегия за разработване на ефективни ЛДС, поради възможността за натоварване на по-големи количества лекарствено вещество.

5. Важно е да се посочи, че е проведено първото в литературата изследване на двойни полимерни мрежи (ДМ), чрез ЯМР спектроскопия с висока разделителна способност при въртене под магически ъгъл, като е определена химическата структура и молекулна природа на взаимодействията, отговорни за изключителната механична здравина на хидрогеловите.

6. Изследванията към третата група представят ЯМР анализите на кинетиката и термодинамика на молекулни взаимодействия и молекулна динамика в разтвор и са представени в 8 публикации.

На база на установените молекулни взаимодействия и кинетика на реакции, е разработен нов метод за модулиране на противотуморната активност на капсули чрез включване на целеви молекули в тях.

7. Може да се подчертае, че изследванията на д-р Шестакова са довели до комбинирано приложение на експериментални ЯМР техники и теоретични (*ab initio*) методи за структурен и конформационен анализ. В 22 от научните публикации са представени резултатите от тези анализи и информация за структурата на синтетични и природни продукти с потенциална биологична активност. Тук тя предлага нов метод за количествен анализ на съдържанието на сескитерпенови лактони в екстракти от

Arnica Montana L. Предимство на този метод е, че позволява да се определи общото количество лактони в сместа, без да е необходимо предварителното разделяне и идентифициране на индивидуалните компоненти.

Установена е и структурата на 5 изохинолинови алкалоида, изолирани от надземни части на диворастящия вид *Hypocoum lactiflorum*, както и стереохимията на седем нови сескитерпенови линейни дилактони, изолирани от цветовете на *Anthemis auriculata* Bioss.

Подготовка на кадри

От представената справка е видно, че доц. Шестакова е участвала като ръководител и консултант на седем защитени магистърски работи в ФХФ на СУ и ХТМУ-София, в обучение на докторанти в рамките на международни програми - 3 докторанти по програми COST и Еразъм+. Като поканен лектор е изнесла редица лекции в чуждестранни и национални университети и научни институции.

Ръководство и участие в научно-изследователски проекти

След 2003-та година доц. Шестакова е участвала общо в 13 научни проекта финансирани от ФНИ, а също така и като водещ изследовател в инфраструктурен проект, финансиран от ФНИ.

Ръководител е на 6 двустранни международни проекта, финансирани от Фламандския фонд за научни изследвания, Белгия, участва в 3 международни проекта, като единият е финансиран от Седма рамкова програма.

Награди и отличия:

За нивото на научната работа на доц. Шестакова показател са и наградите за най-добър постер на международната конференция в Словения, 2009 г., на годишната сесия на ИОХЦФ-БАН през 2000, 2002, 2003, 2005, 2007 г. и за най-добра статия на ИОХЦФ-БАН за 2004, 2006, 2011 г.

Заклучение: От гореизложеното е видно, че Доц. Павлета Шестакова има значими научни постижения и в своето професионално израстване тя се е развивала като задълбочен изследовател, който освен фундаментални изследвания, е провеждал и научно-приложни разработки. След своята хабилитация тя се включва в разработването на оригинални научни тематика, илюстрация за което са нейните многобройни високо качествени научни публикации. Тя успява да осигури финансирането на научните си изследвания като участва в национални и международни научни проекти. Със своите лични качества и научни приноси, доц. Павлета Шестакова удовлетворява напълно изискванията на Закона за академичното развитие в РБ, Правилника за неговото прилагане и Вътрешните правилници на БАН и ИОХЦФ за заемане на академичната длъжност „Професор”, което ми дава основание **убедено да препоръчам** на уважаемото Научно жури и на НС на ИОХЦФ да ѝ я присъдят.

София, 08.02.2017 г.

Подпис:

/проф. д-р, инж. П. Долашка/