

СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Павлета Стоянова Шестакова
Институт по органична химия с Център по Фитохимия, БАН

на материалите, представени за участие в конкурс
за заемане на академичната длъжност „професор“

в Институт по органична химия с Център по фитохимия (ИОХЦФ), БАН

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

В конкурса за академичната длъжност „професор“, обявен в Държавен вестник, бр. 43 от 31.05.2019 г. и на интернет-страницата на ИОХЦФ-БАН, участва доц. д-р Деница Янчева Панталеева, от ИОХЦФ-БАН, която е единствен кандидат.

1. Общо представяне на процедурата и кандидата

Представеният от доц. Панталеева комплект материали е в съответствие с Правилника за развитие на академичния състав на ИОХЦФ-БАН, и отговаря на критериите на ИОХЦФ-БАН за заемане на академичната длъжност “професор”.

Кандидатът участва с конкурса с общо 39 научни труда, които включват: 33 публикации в научни списания, които се реферират в световните бази данни (Scopus и Web of Science); 2 публикации в сборници от доклади на конгреси, 1 глава от книга, а останалите са публикации в списания без индексация. Разпределението на научните на списанията, в които са публикувани статиите, по съответните квартали (Q-фактор) е както следва: Q1 - 9, в Q2 - 4, Q3 - 7, Q4 – 11, в списания със SJR без IF - 8 публикации.

Научната кариера на доц. Панталеева протича изцяло в ИОХЦФ, БАН, където тя защитава дисертация за ОНС „Доктор“ през 2003г., след което е назначена като химик (2003-2004) и главен асистент (2004-2015), а през април 2015 г. получава академичната длъжност „доцент“. Цялостната научна дейност на доц. Панталеева е обобщена в 80 публикации с нейно участие, по които са забелязани 322 цитата без автоцитатите (справка в Scopus, H-index 11).

2. Обща характеристика на дейността на кандидата

Оценка на научната и научно-приложна дейност

Научната дейност и научните приноси на доц. Панталеева са в областта на органичната химия и могат да бъдат обобщени в следните основни направления: (i) синтез на нови биологично активни съединения с антиоксидантна и антибактериална активност; (ii) структурно охарактеризиране на съединенията и изясняване на механизмите на тяхното действие чрез спектрални и теоретични методи; (iii) оценка на биологичната активност на получените съединения.

Представена е разширена справка на научните приноси на кандидата, в която е дискутирана мотивацията за проведените изследвания, анализирани са получените резултати и мястото им в съответната научна област. Основните научни приноси, включени в справката, са свързани с изследването на структурата и механизмите на действие на природни (ванилин, апоцинин и сиригальдехид) и синтетични (бензимидазолови производни, нитроароматни съединения и техни анионни и радикал-анионни интермедиати) антиоксиданти и прооксиданти.

Резултатите от тези изследванията обхващат 10 от публикациите за участие в конкурса. Въз основа на проведените научни изследвания са предложени механизми на антиоксидантното и прооксидантно действие на съединенията в полярна и неполярна среда, като са изведени корелационни зависимости между тяхната биологична активност и набор от молекулни параметри получени чрез комбинирани DFT теоретични и ИЧ спектрални изследвания.

Друго основно направление в научната работа на доц. Панталеева, което включва 11 от представените публикации, обхваща изследвания свързани със синтеза и биологичната активност на производни на дидепсипептиди, бензимидазоли, тиенопиримидини 2-амино-5-алкилидентиазоло-4-они и установяване на връзката между тяхната структура и биологична активност (QSAR изследвания). Структурата на синтезираните съединения е доказана с ИЧ и ЯМР спектрални методи и е проведен теоретичен анализ на електронната структура и геометрията на молекулите. Съединенията са изследвани за антибактериална, противоракова, антипаразитна активност, проведени са *In silico* фармакокинетични и токсикологични проучвания на инхибираща активност спрямо ензима ДНКаза I. Приносът на изследванията от това направление е свързан с възможността за дизайн на нови производни с подобрени фармакологични свойства и по-ниска токсичност, както и за подбор на най-обещаващи кандидати за потенциални фармакологични приложения.

Съгласно изискванията на правилникът на ИОХЦФ, като част от справката за научните приноси, доц. Панталеева е представила своите „Перспективи за научни изследвания през следващите 5 години“. Освен продължаване на изследванията, свързани с разработване на нови биологично активни структури с цитопротективни свойства на базата на бензимидазолови производни, доц. Панталеева предвижда да насочи усилия в две сравнително нови области, където вече има получени обещаващи резултати: (i) изследване на вторичната структура на протеини чрез ИЧ спектроскопия, съвместно с колеги от лаб. ХББЕ в ИОХЦФ, БАН и (ii) спектроскопски изследвания на материали от културното наследство, в сътрудничество с колеги от катедра „Реставрация“ при НХА. Представените планове за научни изследвания очертават бъдещата научна тематика на доц. Панталеева, като актуална, интердисциплинарна и перспективна за развитието на ИОХЦФ, БАН.

Прави впечатление, че голяма част от научната дейност на доц. Панталеева се реализира в рамките на национални и международни сътрудничества и научни колективи, което демонстрира нейните умения за установяване на ползотворни научни контакти.

Участие в проекти и научни форуми

Представена е информация за участие на доц. Панталеева в 20 научно-изследователски проекта, от които 14 национални, 3 международни и 3 национални младежки проекта, на които доц. Панталеева е била ръководител.

Резултатите от научните изследвания на доц. Панталеева са представени основно чрез постери на международни (26 постера) и национални (7 постера) научни форуми, както и два научни доклада на международни форуми.

Оценка на учебно-педагогическата дейност

Доц. Панталеева има активна преподавателска дейност, която е свързана с ръководство на четирима дипломанти от магистърски програми на ХТМУ и четирима специализанти в рамките на проект „Студентски практики – Фаза I“ на МОН. Признание за умението на доц. Панталеева да обучава млади изследователи е наградата "Аквахим-2019" за най-добра дипломна работа по химия, организиран от Федерацията на научно-техническите съюзи и Съюза на химиците в България през 2019 г.

От 2018 г. доц. Панталеева е ръководител на един редовен докторант.

Оценка на личния принос на кандидата

Доц. Панталеева е първи автор или автор за кореспонденция в девет от приложенията за участие в конкурса публикации. Нейният личен принос е свързан основно със синтеза и структурното охарактеризиране на изследваните съединения чрез спектрални (основно ИЧ) и теоретични методи. По своята същност изследванията, включени в представените за участие в конкурса материали са интердисциплинарни, което предполага участие на по-големи научни колективи. Независимо от това считам, че приносът на доц. Панталеева в представените за участие в конкурса публикации и изследвания е ясно очертан и безспорен.

Лични впечатления

Личните ми впечатления от доц. Панталеева са, че тя е самостоятелен и перспективен за ИОХЦФ учен, който умее да работи в интердисциплинарни научни колективи, с много добър опит в привличането и подготовката на млади изследователи. Доц. Панталеева работи в актуална научна област, свързана със синтез, структурно охарактеризиране и оценка на биологичната активност на нови съединения с потенциална фармакологична значимост, която се вписва много добре в научната тематика на ИОХЦФ-БАН.

Бих искала да отбележа важният принос на доц. Панталеева в изключително интересното направление свързано с изследване на образци от материалното културно наследство, което се реализира в рамките на няколко проекта с ФНИ, и заема съществено място като основна тематика на Модул 2 в проект „ИНФРАМАТ“ от националната пътна карта за научна инфраструктура.

3. Критични забележки и препоръки

Нямам критични бележки към кандидата, но бих препоръчала на доц. Панталеева в бъдещата си работа да разшири наборът от спектрални методи, които използва в научните си изследвания.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Научната дейност и наукометричните показатели на доц. Панталеева отразени в представените за участие в конкурса материали, покриват и надхвърлят изискванията за заемане на академичната длъжност „професор“, съгласно Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, Правилника за прилагане на ЗРАСРБ на БАН и Правилника на ИОХЦФ-БАН.

След запознаване с представените в конкурса материали и научни трудове, анализ на тяхната значимост и съдържащите се в тях научни приноси, давам своята положителна оценка и препоръчвам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ-БАН за избор на доц. д-р Деница Янчева Панталеева на академичната длъжност „професор“ в ИОХЦФ-БАН по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност: „Органична химия“.

09. 09. 2019 г.

Изготвил становището:

Проф. д-р Павлета Шестакова

OPINION

from Prof. Dr. Pavletta Stoyanova Shestakova
Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry, BAS

on the materials presented for the competition for the academic position of **"Professor"**
at the Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry (IOCCP), BAS

in Higher education field **4. Natural Sciences, Mathematics and informatics**
Professional field **4.2. Chemical Sciences**, Scientific specialty **"Organic chemistry"**

Assoc. Prof. Dr. Denitsa Yancheva Pantaleeva from the Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry, BAS, is the only candidate in the competition for the academic position of "Professor", announced in the State Gazette, issue. 43 of 31.05.2019 and on the website of IOCCP-BAS.

1. General presentation of the procedure and the applicant

The set of materials presented by Associate Professor Pantaleeva is in accordance with the Rules for the Development of the Academic Staff of IOCCP-BAS, and meets the criteria of IOCCP-BAS for the academic position of "Professor".

The applicant participates in the competition with a total of 39 scientific papers, which include: 33 publications in scientific journals, which are referenced in international databases (Scopus and Web of Science); 2 publications in congressional reports, 1 book chapter, and the rest are non-indexed journals. The distribution of the scientific journals in which the articles were published by quartiles (Q-factor) is as follows: Q1 - 9, Q2 - 4, Q3 - 7, Q4 - 11, in journals with SJR without IF - 8 publications.

Assoc. Prof. Pantaleeva's scientific career is entirely at IOCCP-BAS, where she defended her doctoral thesis in 2003, after which she was appointed as a chemist (2003-2004) and a senior assistant researcher (2004-2015), and in April 2015 she received the academic position of Associate Professor. Assoc. Prof. Pantaleeva's entire scientific activity has been summarized in 80 publications with her participation, on which 322 citations without self-citations have been noted (Scopus, H-index 11).

2. General characteristics of the applicant's activities

Evaluation of scientific and applied research activities

Assoc. Prof. Pantaleeva's scientific work and scientific contributions are in the field of organic chemistry and can be summarized in the following main directions: (i) synthesis of new biologically active compounds with antioxidant and antibacterial activity; (ii) structural characterization of the compounds and elucidation of the mechanisms of their activity by spectral and theoretical methods; (iii) assessment of the biological activity of the obtained compounds.

An extensive habilitation report on the applicant's scientific contributions is presented (both in Bulgarian and in English), in which the motivation for the studies is discussed, the results obtained and their place in the relevant scientific field are analyzed. The main scientific contributions included in the habilitation report are related to the investigation of the structure and mechanisms of action of natural (vanillin, apocynin and syringaldehyde) and synthetic (benzimidazole derivatives, nitroaromatic compounds and their anionic and radical anionic intermediates) antioxidants.

The results of these studies are summaries in 10 of the publications presented for the competition. Mechanisms of the antioxidant and pro-oxidant effects of the compounds in polar and non-polar environments have been proposed based on the research performed, correlating their

biological activity and a set of molecular parameters obtained through combined DFT theoretical and IR spectral studies.

Another major area of scientific work of Assoc. Prof. Pantaleeva, which includes 11 of the presented publications, covers studies related to the synthesis and biological activity of derivatives of dipeptides, benzimidazoles, thienopyrimidines 2-amino-5-alkylidiazol-4-ones and establishing the relationship between their structure and biological activity (QSAR studies). The structure of the synthesized compounds was elucidated by IR and NMR spectroscopy, and theoretical analysis of the electronic structure and geometry of the molecules was performed.

The compounds have been tested for antibacterial, anticancer, antiparasitic activity, *In silico* pharmacokinetic and toxicological studies have been performed on inhibitory activity of the DNase I enzyme. The contribution of research in this area is related to the possibility of designing new derivatives with improved pharmacological properties and lower toxicity, as well as the selection of the most promising candidates for potential pharmacological applications.

As part of the extended habilitation report, Assoc. Prof. Pantaleeva has presented her "Prospects for research over the next 5 years". In addition to continuing research related to the development of new biologically active structures with cytoprotective properties based on benzimidazole derivatives, Assoc. Prof. Pantaleeva plans to focus efforts in two relatively new areas where promising results have already been obtained: (i) study of the secondary structure of proteins by IR spectroscopy, in cooperation with colleagues from the laboratory of "Chemistry and Biophysics of Proteins and Enzymes" at IOCCP-BAS; and (ii) spectroscopic studies of cultural heritage artefacts, in collaboration with colleagues from the department of "Restoration" at the National Academy of Arts. The presented research plans outline the future scientific topics of Assoc. Prof. Pantaleeva, as relevant, interdisciplinary and perspective for the development of IOCCP-BAS.

A large part of Assoc. Prof. Pantaleeva's scientific work is realized within the framework of national and international collaborations and research teams, which demonstrates her ability to establish fruitful scientific contacts.

Participation in projects and scientific forums

Information was presented on the participation of Assoc. Prof. Pantaleeva in 20 research projects, of which 14 national, 3 international and 3 national youth projects, of which Assoc. Prof. Pantaleeva was a coordinator.

Assoc. Prof. Pantaleeva's research results are presented mainly through posters at international (26 posters) and national (7 posters) scientific forums, as well as in two scientific reports at international forums.

Assessment of educational and pedagogical activity

Assoc. Prof. Pantaleeva has an active teaching activity; she has supervised four Master degree theses of students from the University of Chemical Technology and Metallurgy, and four postgraduate students within the framework of the "Student Practices - Phase I" project of the Ministry of Education and Science. Acknowledgment of Assoc. Prof. Pantaleeva's ability to train young researchers is the "Aquachim-2019" Award for Best Chemistry Diploma, organized by the Federation of Scientific and Technical Unions and the Union of Chemists in Bulgaria in 2019.

As of 2018, Assoc. Prof. Pantaleeva is promotor of a full-time PhD student.

Assessment of the applicant's personal contribution

Assoc. Prof. Pantaleeva is the first author or author for correspondence in nine of the publications submitted for participation in the competition. Her personal contribution is mainly related to the synthesis and structural characterization of the compounds studied by spectral (mainly IR) and

theoretical methods. The research activity of the candidate is interdisciplinary by its nature, which implies the participation of larger scientific teams. Nevertheless, I believe that the contribution of Assoc. Prof. Pantaleeva in the publications and research presented for participation in the competition is clearly outlined and indisputable.

Personal impressions

My personal impressions of Assoc. Prof. Pantaleeva are that she is an independent and promising scientist for IOCCP-BAS, able to work in interdisciplinary research teams, with very good experience in attracting and training young researchers. Associate Professor Pantaleeva works in a topical scientific field related to the synthesis, structural characterization and evaluation of the biological activity of new compounds of potential pharmacological importance, which fits very well into the scientific topics of IOCCP-BAS.

I would like to point out the important contribution of Assoc. Prof. Pantaleeva in the very interesting area related to the study of artefacts and objects from the material cultural heritage, which is realized in the framework of several projects funded by NSF, and occupies a significant place as the main topic of Module 2 in the INFRAMAT project that is part of the National Research Infrastructure Roadmap of Bulgaria.

3. Critical comments and recommendations

I have no critical comments on the candidate, but I would recommend Assoc. Prof. Pantaleeva in her future work to extend the range of spectral methods she uses in her research.

CONCLUSION

The scientific activity and research metric indicators of Assoc. Prof. Denitsa Pantaleeva reflected in the materials submitted for participation in the competition, cover and exceed the requirements for the academic position of "Professor", according to the Law for the Development of the Academic Staff in the Republic of Bulgaria, The Regulations of BAS for the Implementation of this Law and the Regulations of IOCCP-BAS.

After the analysis of the research output of Assoc. Prof. Denitsa Pantaleeva, its importance and the scientific contributions reflected therein, **I give my positive assessment** and recommend to the Scientific Jury to prepare a report-proposal to the Scientific Board of IOCCP-BAS for the selection of Assoc. Prof. Denitsa Yancheva Pantaleeva, PhD, at the academic position of "Professor" at IOCCP-BAS in the professional field 4.2. Chemical Sciences, scientific specialty: Organic Chemistry.

09. 09. 2019 r.

Reviewer:

Prof. Dr. Pavletta Shestakova