

● **Academic Archives** ●

Новият Закон за развитието на академичния състав в Република България (2010) отмени научните звания и въведе процедури за заемане на академичните длъжности в научните организации. Научно жури от 7 специалисти с 3 рецензии и 4 становища взема решение за заемане на академичната длъжност „професор”. Публикуването на рецензиите осигурява тяхната по-широка публичност и повишава отговорността на техните автори. За постигане на тези цели нашето списание въвежда рубриката “Academic Archives.”

**КОНКУРС ЗА ЗАЕМАНЕ НА
АКАДЕМИЧНА ДЛЪЖНОСТ
„ПРОФЕСОР ПО ТЕОРЕТИЧНА ХИМИЯ”
В КАТЕДРАТА ПО ФИЗИКОХИМИЯ НА
СОФИЙСКИЯ УНИВЕРСИТЕТ
„СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ”
С КАНДИДАТ ДОЦ. Д-Р АЛЯ ВИТАЛИ
ТАДЖЕР¹⁾**

Б. В. ТОШЕВ

Софийски университет „Св. Климент Охридски”

Резюме. Доц. д-р Аля Витали Таджер е кандидат в конкурс за заемане на академична длъжност „професор по теоретична химия” в Катедрата по физикохимия на Софийския университет „Св. Климент Охридски”. Рецензията на проф. д-рн Борислав Тошев анализира

учебната дейност и научните постижения на доц. Таджер и достига до заключението, че заемането на тази конкурсна длъжност от доц. Таджер е целесъобразно.

Keywords: theoretical chemistry, quantum chemistry, computational chemistry, dyes, polyaniline, monolayers, Tadjer

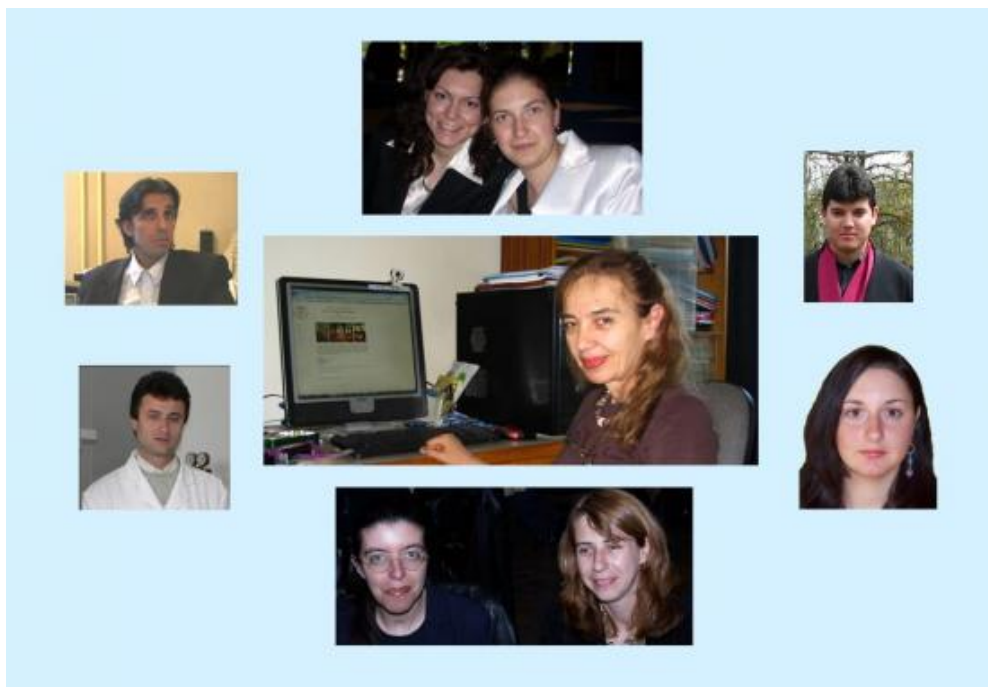
Тази рецензия дава отговор на два въпроса: 1. дали в Катедрата по физикохимия на Софийския университет “Св. Климент Охридски” е целесъобразно и необходимо да има професор по теоретична химия и 2. дали единственият кандидат в този конкурс, доц. д-р Аля Витали Таджер, е достойна да заеме тази академична длъжност.

1. Катедрата по физикохимия е основана в края на 1927 г. под името Катедра по теоретична химия. Титуляр на Катедрата е световно известният български и германски учен проф. д-р Иван Странски. Въпреки че основната тематика на Катедрата в годините на нейното съществуване е теорията на образуване на нови фази в преситени системи с всичките ѝ възможни приложения, значението на квантовата химия и нейните изчислителни техники на атомно и молекулно ниво винаги са разглеждани като съществена част от физикохимичния инструментариум. Затова встъпителната лекция на Иван Странски (1925/1926) е “Теоретичната химия, нейното развитие и нейната цел”, а по-късно се появява и “Квантовата химия и нейното значение за химията” (Странски, 1926). Квантовата химия заема централно място и в учебника по физикохимия от 1952 г. (Каишев & Христов, 1952). Това е основата, върху която се развиват съвременните изследвания по квантова и изчислителна химия в Катедрата по физикохимия, в която от доста време работи един от пионерите на българската квантова химия – проф. д-р Николай Тютюлков. Очевидно проф. Тютюлков намира

физикохимичната среда за стимулираща, доказателство за което е току що публикуваната му нова книга (Тютюлков & Дитц, 2011). В Катедрата по физикохимия успешно се развива Учебно-научна лаборатория по квантова и изчислителна химия, която организира авторитетен международен Клуб-семинар *In Silico* под ръководството на ръководителя на Лабораторията доц. Аля Таджер. При такива обстоятелства изглежда очевидно, че една професура по теоретична химия в Катедрата по физикохимия ще гарантира за дълго време възходящото развитие на въпросната научна проблематика заедно с нейните образователни проекции.

2. Единствен кандидат в конкурса за професор по теоретична химия е г-жа доц. (от 2000 г.), д-р (от 1982 г.) Аля Витали Таджер (р. 1950 г. в София), ръководител на посочената по-горе Лаборатория в Катедрата по физикохимия. Аля Таджер е провела успешни специализации в САЩ, Германия, Обединеното кралство, Австралия и Франция. Тя е титуляр на курсовете по строеж на веществото, теоретична химия, квантова химия и химична връзка и др. за образователно-квалификационната степен “бакалавър”, чете курсове и на магистърско ниво, където е в ръководството на университетската магистърска програма по изчислителна химия. Несъмнено конкурсът за професор по теоретична химия е обезпечен с голям излишък аудиторна учебна заетост. Способността за ефективна работа в екип и рядкото качество лидерство (leadership) характеризат най-добре личността Таджер. Тези качества се манифестират с това, че нейните старши сътрудници доц. д-р Анела Иванова и гл.ас. д-р Галя Маджарова се развиват особено успешно на научното поприще, а лабораторията, ръководена от доц. Таджер, е желано място за много ентузиазирани студенти, защото там те получават знанията, уменията и грижата на старшия персонал за бъдещата им успешна научна кариера. Затова е

логично, че в кариерата си доц. Таджер е подготвила 31 дипломанти и 9 докторанти, повечето от които имат вече собствени научни постижения, за което някои от тях са получили признание и в чужбина. Успехите на д-р Таджер в подготовката на специалисти с най-висока квалификация получи тази година и национално признание – за тази дейност тя получи престижната в България награда „Питагор”. Имам много свидетелства, които потвърждават международната разпознаваемост на доц. Таджер на полето на науката. Между тях е членството на доц. Таджер в редакционните колегии на *International Journal of Quantum Chemistry* (от 2002 г.) и на американското списание *ARKIVOS* (от 2007 г.). Редовно доц. Таджер е търсена за рецензент в системата на рецензирване на няколко престижни научни списания. В качеството ми на ресорен министър за висшето образование в Министерството на образованието и науката имах възможност да проследя проведената през 2001 г. в резиденцията “Бояна” Европейска конференция по квантовите системи в химията и физиката, в организацията на която доц. Таджер имаше ключовата роля. Там бях уважаван от явно видимата нейна международна репутация. Участието на доц. Таджер и нейните сътрудници в научния живот в нейната област е забележително, което се вижда от приложения в документацията по конкурса списък. Длъжен съм да отбележа и активното участие на доц. Таджер в проектното финансиране на научната дейност. В качеството ми на председател на научно-експертни комисии към Националния фонд “Научни изследвания” познавам в подробности представените от Таджер проекти и отчетите към тях – яснота на идеите и съжденията, прецизност в използването на теоретичния инструментариум, актуалност на обсъжданите научни проблеми – това в съвкупност характеризира тези научни документи.



Доц. д-р Аля Таджер (в средата) със сътрудници (отдолу по часовниковата стрелка): д-р Галя Маджарова, доц. д-р Анела Иванова, д-р Цветанов, д-р Фратев, Петрова и Велинова, д-р Дребов, д-р Романова

От 2001 г., след получаването на научното звание „доцент” през 2000 г., д-р Таджер е публикувала 41 научни труда, всички в съавторство. Последната работа на автора под № 71 в списъка на публикациите, отбелязана като „изпратена”, вече е публикувана (Petrova et al., 2011). В SCOPUS има 55 документа, принадлежащи на д-р Таджер, най-ранният от които е от 1975 г. и е № 1 от списъка на кандидата. SCOPUS съобщава за 80 съавтори в тези научни статии, в които цитираните източници са 1375 и тези статии са получили 228 цитата (в документацията по конкурса е представен подробен списък на 347 забелязани цитати, от които 192 са цитати на монографията “Polymethine Dyes” (Tyutyulkov et al., 1991). Списъкът на цитатите сигурно не е пълен, защото, разглеждайки го внимателно, аз не намирам някои от известните на мен цитирания на трудовете на д-р Таджер (впрочем последният

известен на мен цитат (Lu et al., 2011) е от 22 април). Обектите на изследване в тези публикации са много разнообразни – от молекули и йони до супермолекули от типа на полимерите и молекулните агрегати с различна размерност, формирани от близко- и далечно-действащи сили. Методите и техниките на квантовата и изчислителната химия са прилагани към голямо разнообразие на химични субекти – полиени, полиметини, полиацени, полианилини, антиароматни молекули и хетероциклени съединения, антиоксиданти, антитуморни агенти, метал-органични комплекси, неразтворими монослое и мицели. Претенцията на автора за научен принос в нейните публикации е представена в обширна и ясно написана справка. Аз изцяло приемам тази справка на кандидата, но намирам, че тя е написана излишно подробно. Ясно е, че тя отразява осъзнатата от автора необходимост да се направи рекапитулация на получените научни резултати, във от хронологичното им проследяване, да се погледне „отгоре” на реализираната научна дейност. Затова ще препоръчам на д-р Таджер да подготви без отлагане дисертационен труд за научната степен „доктор на химическите науки”, който е най-добрата форма за маркиране и запазване за автора на част от научното поле, в което той работи.

Ще се въздържа да давам оценки по специфични проблеми от творчеството на кандидата в области, в които аз самият нямам собствени научни публикации. Това със сигурност ще направят другите рецензенти по този конкурс. Има, обаче, тематики, по които такова категорично мнение мога да дам – самоорганизацията в дисперсните системи в междуфазовите повърхности (неразтворимите монослое) и в обема на фазите – образуването на мицели. Много от получените резултати са с приносен характер, например в случая на повърхностноактивни молекули в присъствие на малко вода структурирането на водните молекули в монослоя е такова, че да се осигури образуването на най-

голям брой водородни връзки, както между самите водни молекули, така и с молекулите на сурфактанта; определен е броят на молекулите на разтворителя, над който се достига насищане на стойността на нормалната компонента на диполния момент като е изяснена ролята на латералните взаимодействия с молекулите на повърхностноактивното вещество; освен случаите с плътна опаковка на молекулите на едно повърхностноактивно вещество в слоя е разгледан и случаят на моделни слоеве от два различни липида, при това в целия диапазон от повърхностни концентрации заедно с реорганизацията на молекулите при компресия на слоя. Така е определена еднозначно ролята на водата в повърхностния слой за електричните характеристики на слоя, с което се опровергава приетото до сега схващане за водата като пасивен спрямо енергетиката на слоя субстрат. Във всички изследвания симулациите са с Монте Карло или молекулна динамика техники. Известно е, че липидните слоеве са модели на клетъчни мембрани – тогава проникването на лекарства в клетката през клетъчната мембрана може да стане чрез капсуловането им в биосъвместими наноконтейнери, а модел на такъв носител са мицели от олигоетиленгликолови етери на висши мастни киселини. Молекулните симулации в такива системи предполагат преодоляването на редица проблеми в използваните изчислителни методи, което авторите на тези статии са постигнали и затова медицинските проекции на изследванията на д-р Таджер несъмнено ангажират обществено внимание, което е документирано в научната литература.

Ще завърша тази рецензия още с два акцента. В наукометрията е введен показателят response time [време на отзвук], τ_1 – това е времето, след което една публикация получава своя първи цитат. Очевидно стойността на този параметър маркира моментът, когато една статия променя своя статут – от *незабелязана и неизползвана* към *използвана и*

оценена. Има две статии на д-р Таджер, които са с $\tau_1 \leq 1$ [год] – Velkov et al. (2007) и Velkov et al. (2009). Очевидно това е добър атестат за научното творчество на кандидата. Впрочем втората статия е квантово-химично и биохимично изследване на антиоксидантната активност на мелатонина. Нов индикатор за актуалността на научните изследвания на даден изследовател е въведеният през 2005 г. *h*-индекс на Хирш. Голямата стойност на *h*-индекса на даден учен означава, че неговите изследвания в неголям съвременен период (например последните 5-10 години) ангажират голямо обществено влияние, и следователно, такава проблематика, носи белезите на актуалността в дадения момент. За това този индекс е въведен главно за целите на проектното финансиране. По данни на SCOPUS д-р Таджер има *h*-индекс=8, което, несъмнено, е добър атестат за нея.

Отговорите на двата въпроса, поставени в началото на настоящата рецензия, са категорично положителни – 1. Катедрата по физикохимия на Софийския университет „Св. Климент Охридски” има нужда от академична длъжност „професор по теоретична химия”, което ще осигури продължаване на възходящото ѝ развитие и 2. достойният кандидат за заемане на тази академична позиция е доц. д-р Аля Витали Таджер. Моята препоръка към почитаемото научно жури в своя анализ на постъпилата конкурсна документация да достигне до същото заключение.

Ст. София, Разпети петък, 22 Април 2011 г.

БЕЛЕЖКИ

1. Журнален вариант. В конкурса са представени още две рецензии с положително заключение – на проф. дхн Петко Иванов от Института по органична химия с Център по фитохимия и на ст.н.д. д-р Цонка Минева, Montpellier, Франция.

ЛИТЕРАТУРА

- Lu, H., Shimizu, S., MacK, J., Shen, Z. & Kobayashi, N. (2011). Synthesis and spectroscopic properties of fused-ring-expanded azaboradiazaindecenes. *Chemistry – An Asian J.*, 6, 2026-1031.
- Petrova, J.B., Romanova, J.R., Madjarova, G.K., Ivanova, A.N. & Tadjer, A.V. (2011). Fully doped oligomers of emeraldine salt: polaronic versus bipolaronic configuration. *J. Phys. Chem. B*, 115, 3765-3776.
- Tyutyulkov, N., Fabian, J., Mehlhorn, A., Dietz, F. & Tadjer, A. (1991). *Polymethine dyes: structure and properties*. Sofia: Sofia University Press.
- Velkov, A, Velkov, Z., Galunska, B.T., Paskalev, D.N. & Tadjer, A.V. (2009). Melatonin: quantum-chemical and biochemical investigation of antioxidant activity. *Eur. J. Medicinal Chem.*, 44, 2834-2839.
- Velkov, Z.A., Kolev, M.K. & Tadjer, A.V. (2007). Modeling and statistical analysis of DPPH scavenging activity of phenolics. *Coll. Czech. Chem. Commn.*, 72, 1461-1471.
- Каишев, Р. & Христов, С.Г. (1952). *Физикохимия. Първа част*. София: Наука и изкуство.
- Странски, И. (1925/1926). Теоретичната химия, нейното развитие и нейната цел. Встъпителна лекция. *Год. Соф. Унив. Физ.-мат. Фак.*, 22(2), 97-111.
- Странски, И. (1926). Квантовата химия и нейното значение за химията. *Химия и индустрия*, 5, 161-172.
- Тютюлков, Н. & Дитц, Ф. (2011). *Симетрия. Строеж и свойства на молекулите*. София: Изкуства.

**ACADEMIC POSITION “PROFESSOR IN
THEORETICAL CHEMISTRY” AT THE
DEPARTMENT OF PHYSICAL CHEMISTRY,
UNIVERSITY OF SOFIA: DOC. DR. ALYA
TADJER**

Abstract. This is a review of the teaching and research activity of Dr. Alya Vitali Tadjer who applies for the academic position “Professor in Theoretical Chemistry” at the Department of Physical Chemistry, University of Sofia.

✉ Professor B.V. Toshev,
University of Sofia,
1 James Bourchier Blvd.,
1164 Sofia, BULGARIA
E_Mail: toshev@chem.uni-sofia.bg