

СТАНОВИЩЕ

по конкурс за избор на „доцент“ по професионално направление 4.2. „Химически науки“ (Теоретична химия) за нуждите на Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, обявен в ДВ бр. 21/15. 03. 2022 г.

Изготвил становището: проф. дхн Таня Стоянова Цончева (Христова), Институт по органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките

на основание на заповед No РД-38-192/12. 04. 2022 г. на Ректора на СУ „Св. Климент Охридски“

Кандидат по конкурса: д-р Искра Зарева Колева, главен асистент в катедра „Фармацевтична и приложна химия“, ФХФ, СУ

Професионална биография на кандидата

Искра Колева е родена през 1989 г. През 2013 г. завършва като магистър по „Материалознание“ Факултета по химия и фармация на СУ. През 2017 г. защитава докторска дисертация по „Теоретична химия“ на тема „Квантово-химично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев оксид“ в същия факултет. От 2017 г. тя заема длъжността главен асистент в катедрата по „Фармацевтична и приложна химия“, ФХФ, СУ.

Учебна дейност

През последните 5 години, гл. ас. д-р Искра Колева води упражнения по бакалавърска програма „Инструментални методи в химията“ и редица магистърски програми, като: „Фармацевтичен анализ“, „Компютърни методи в спектроскопията“, „Хибридни (QM/MM) методи“, „Моделиране на периодични системи и наноструктури“ и „Биофармация“ с обща заетост над 1700 часа. Била е ръководител на 1 дипломант.

Научно-изследователска дейност

Научната дейност на д-р Искра Колева е свързани предимно с теоретични изследвания в областта на хетерогенния катализ. В тази област, тя е съавтор на 18 научни статии в списания с импакт фактор. От включените в конкурса 14 публикации, 11 са публикувани в списания с квантил Q1 и 3 – с Q2). Върху тях са забелязани 154 цитата. Част от резултатите са представени чрез устни или постерни доклади на над 10 научни форуми. Активно участва и в организирането на национални и международни конференции. Многократно е член на научния

колектив на национални и Европейски проекти. H-факторът, съгласно данни от SCOPUS, е 6. Носител е на награда на L'Oréal и ЮНЕСКО „За жените в науката“ за 2020 г.

Хабилитационен труд

Хабилитационният труд на д-р Колева е посветен на „Квантово-химично изследване на хетерогенни каталитични системи, съдържащи цериев диоксид и метални наночастици“. В него са включени резултати, публикувани в 4 престижни научни списания, 3 от които са с квантил Q1, и 1-с квантил Q2. В две от публикациите, кандидатът е на първо място в авторския колектив, а в останалите-на второ. Моделирани са цериевооксидни частици с различна големина, дотирани с различно количество Zr^{4+} йони. За системата, съдържаща един Zr^{4+} йон е установено, че независимо от размера на цериевооксидната частица, най-стабилно е заместването в подповърхностна позиция. Доказано е, че за сравнително големи частици с по-високо съдържание на Zr^{4+} йони енергетично по-изгодно е заместване на подповърхностните позиции, като стабилността на системата е комутативна и се определя от стабилността на заетите позиции в моделите на заместване с 1 Zr^{4+} . Изследванията върху формирането на кислородни ваканции в тези материали показват благоприятното значение на заместването с Zr^{4+} , като най-стабилни са ваканциите в близост до допанта. Показано е, че премахването на четирикоординирани кислородни центрове е най-изгодно при по-големи наночастици.

Заместването на Ce^{4+} с алиовалентен йон (Y^{3+}) в $CeO_2(111)$ повърхности е енергетично най-изгодно, когато Y^{3+} йони са разположени в подповърхностния слой и в близост до тях се намира компенсираща кислородна ваканция. За по-малки частици CeO_2 не е установена предпочитана позиция на Y^{3+} и кислородната ваканция. При по-големи частици, е установена висока стабилност на структурата, в която Y^{3+} катиони са симетрично разположени по върховете на частицата и е формирана ваканция чрез отстраняване на двукоординиран О център от (100) фасета. Оптимизирано е разположението на йоните при създаване на втора О-ваканция в тези частици. За частици с по-високо съдържание на итрий е доказано, че енергетично най-изгодно е формирането на О-ваканции на диагонално противоположни позиции или на две противоположни (100) фасети.

Теоретичните изчисления върху адсорбция на СО върху платинови клъстери, нанесени на CeO_2 имат важно практическо значение. Оптимизирани са модели, включващи различна ориентация на адсорбиращата се молекула, вариране на степента на покритие на повърхността с СО и промени в размера на платиновия клъстер. Ефектът от природата на носителя е проследен чрез съпоставяне с аналогични образци, нанесени върху Al_2O_3 . Доказано е, че за разлика от по-малките платинови клъстери, адсорбцията на СО върху платинови жици е

предпочетено мостово. Теоретичните изчисления показват, че разликата в плътността на 5d нивата на Pt е незначителна за сравнително по-малки кълстери, когато те са нанесени върху CeO_2 и се променя при използването на Al_2O_3 като носител, в резултат на електронен пренос от Pt частица към носителя. Направен е извод, че реактивоспособността на платиновите частици намалява с увеличаване на техния размер и при нарастване на степента на покритие на повърхността с CO.

Изследванията върху взаимодействието на въглерод с метали (Cu, Ag и Au) имат пряко отношение към дезактивацията, а в някои случаи, и към промотирането на катализаторите. Моделирани са както метални наночастици, така и повърхности. Доказано е, че нискокоординираните метални центрове благоприятстват заемането на подповърхностни позиции от C, което е особено добре изразено за Cu и Ag, но този ефект намалява при високи степени на покритие. Показана е стабилизация на вътрешните електронни нива на металните атоми в резултат на взаимодействието им с C, което предполага възникване на частичен положителен заряд. Много важен е изводът, направен въз основа на фазовите диаграми, относно повишената термодинамична стабилност на изолирани C атоми върху Cu, Ag и Au повърхности в условията на каталитична реакция.

Научни приноси на изследвания, не включени в хабилитационния труд

Резултатите от изследванията извън хабилитационния труд са публикувани в 8 публикации с квантил Q1 и 2-с Q2. Те са посветени на квантовохимично моделиране на зеолити, съдържащи метални катиони и взаимодействието на молекули с метални йони и повърхности. Считам, че основните приноси от изследванията са свързани с оценка на комплексообразуването на кукурбитурили с Al^{3+} , Ga^{3+} , In^{3+} , La^{3+} и Lu^{3+} йони в газова фаза и водна среда при отчитане на ефекта от размера на кухината на макроцикъла и pH на средата; изясняване на влиянието на природата на повърхностните функционални групи върху мезопорести силикалити върху адсорбцията на милтефозин, тамоксифен и куркумин; изследване на влиянието на Si дефекти или заместени в зеолитната решетка хетероатоми (Al^{3+} , Ti^{4+}) върху адсорбцията на водороден пероксид, пиридин и ацетонитрил; моделиране на формирането на карбонилни, нитрозилни или смесени карбонил-нитрозилни комплекси в Pt- или Pd- модифицирани зеолити; изследвания върху влиянието на паракват върху йонообмена в зеолити; съпоставяне на стабилността на железни йони в различни позиции в зеолити.

Заклучение

Представените за рецензия документи на д-р Искра Колева показват, че тя е много добър изследовател и утвърден специалист в областта на квантовохимичното моделиране на

материалите. Теоретичните изследвания на кандидата върху разнообразни системи, включващи взаимодействие на метали/метални йони и различни молекули с повърхности и наночастици, имат важно значение за изясняване и оптимизиране на свойствата на материалите с оглед приложението им като адсорбенти и катализатори. Активната публикационна дейност на кандидата, широкият отзвук на получените резултати в чуждестранната литература, съчетани с водещото му участие в голяма част от изследванията, и не на последно място, активната преподавателска дейност, не поставят под съмнение, че д-р Колева удовлетворява напълно изискванията на конкурса. Поради това, убедено препоръчвам на уважаемия Факултетен съвет на Факултета по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“ да присъди на д-р Искра Колева академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. „Химически науки“, научна специалност „Теоретична химия“.

6.06.2022

София

Изготвил становището:

/проф. дхн Таня Цончева/