

СТАНОВИЩЕ

от професор Константин Тодоров Балашев, дн

по конкурс за заемане на академичната длъжност „Професор“ в професионално направление 4.2. Химически науки за научна специалност „Теоретична химия – Изчислителна химия“, за нуждите на Факултета по Химия и Фармация на СУ „Св. Кл. Охридски“, обявен в ДВ, брой № 21 от 15.03.2022 г., с кандидат

доц. д-р Галя Костова Маджарова

1. Общи положения и кратка характеристика на кандидата

В конкурса за професор по Теоретична химия – Изчислителна химия към Факултета по химия и фармация на СУ участва единствен кандидат – доц. д-р Галя Костова Маджарова. Доц. Маджарова завършва през 1995 г. висшето си образование с магистърска степен по Химия и със специализация по Химична физика и теоретична химия в Химическия факултет на СУ „Св. Кл. Охридски“, след което в периода 1996-1999 е докторант и успешно защитава през 1999 г докторат по Теоретична химия. Нейното кариерно развитие започва през 2001, когато е избрана за асистент в катедра Физикохимия на ХФ. След това, преминавайки през академичните длъжности ст. асистент (2002- 2005) и гл. ас. (2005-2013), през 2013 г. тя е хабилитирана като доцент в катедрата, длъжност която заема и понастоящем. Има множество специализации във водещи университети и научни институции в Германия, Япония, Франция и Великобритания.

2. Описание на представените материали

Доц. Маджарова е изготвила и представила в таблична форма справка за изпълнение на минималните национални изисквания за заемане на научната длъжност „професор“. Тя участва в конкурса с научна продукция от 41 публикации, повечето от които са във водещи специализирани международни списания. В базата данни „Scopus“ към днешна дата (07.07.2022) се откриват 31 нейни статии с 436 цитата. Хирш индексът ѝ е 13, без отчитане на самоцитиранията от всички съавтори.

Представеният списък за участие в конкурса от 11 публикации (*приложение 3*), включва публикации, които изцяло попадат в тематиката на обявения конкурс и са в реномирани и водещи за областта на теоретичната химия списания, като The Journal of Physical Chemistry B, Journal of Chemical Theory and Computation, Applied Physics, Journal of Molecular Liquids и др.

Доц. Маджарова е представила хабилитационен труд от 92 стр. на тема „Дизайн на нови твърди магнитни материали без използването на редкоземни елементи“, обобщаващ основните ѝ научни приноси към теоретичното моделиране на материали, които имат ясно изразена приложна значимост. Тя е била активен

участник в множество, финансирани от СУ, МОН или по европейски и международни програми, научни проекти, като в 6 от тях, след хабилитирането си е била ръководител.

Показателите за дейността на Доц. Маджарова надхвърлят в значителна степен минималните национални изисквания и тези на ФХФ към научната дейност на кандидатите за заемане на академична длъжност "Професор". Това е демонстрирано в таблицата:

Група показатели	Национални изисквания	Изисквания на ФХФ	Постигнати точки
А	50	50	50
В	100	100	100
Г	200	220	257
Д	50	60	258
Е	150	150	270
Ж	-	120	160

3. Обща характеристика на научноизследователската, педагогическа и научно-приложната дейност на кандидата

Изследванията на доц. Маджарова са в две научни направления от теоретичната химия- атомистични молекулнодинамични симулации и квантовохимични методи за моделиране и приложение на методите на машинното обучение. Нейната учебно-преподавателската дейност е като лектор по основни курсове, като Строеж на веществото, Молекулно моделиране на материали, Квантова химия и молекулна механика, Теоретична химия и Приложна изчислителна химия, които са в бакалавърските програми на специалностите, Химия, Екохимия и др. във ФХФ на СУ. Доц. Маджарова е била ръководител на четирима дипломанти, успешно защитили магистърски или бакалавърски тези, а в момента е ръководител на докторант, зачислен през 2021 г.

4. Основни научни и научно-приложни приноси

Приносите на доц. Маджарова могат да се систематизират според горепосочените направления на научната ѝ дейност, както следва:

- Изследване на надмолекулната структурна организация на обърната хексагонална мезофаза, изградена от глицеролмоноолеат (GMO), трикаприн и вода, (статии [1,4] от приложение 10B).
- Изследване на спонтанната агрегация на серия от соли на жлъчни киселини във воден разтвор, факторите за формирането на първични мицели от солите им и структурата на агрегатите, получени в хода на молекулнодинамичните симулации (статия [2] от приложение 10B).

- Механизъм на свързване на системи за активна доставка на лекарства, която е базирана на фолат или антифолати, с моделиране на всички компоненти от система за активен транспорт на лекарства, към α -фолатен рецептор (FR α), (статии [7 -11] от приложение 10B).
- Приложение на времезависимата теория на функционала на плътността (TDDFT) за пресмятане спектъра на възбуждане в молекулни кристали и 1D полимери при молекулните кристали на пицен, пентацен и 1D-полимера поли(p-фениленвенилен), (статии [2] от приложение 10B).
- Моделиране на магнитните свойства на постоянни магнити без редкоземни елементи в структурата, като са изследвани магнитните свойства на Heusler-сплави и е оценена възможността за тетрагонална [5] и хексагонална деформации (статии [6] от приложение 10B, монография).

7. Лични впечатления на рецензента за кандидата

С доц. Маджарова се познавам още от годините, когато двамата с нея бяхме докторанти в катедрата по Физикохимия на ФХФ на СУ и винаги високо съм ценял нейната компетентност като специалист и отзивчивост на колега. Особено полезни за мен са били многото и ползотворни дискусии които сме провеждали с нея в семинарите на катедрата или тези, при съвместно ни участие в някои от научните проекти на ФХФ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените документи от доц. Маджарова, като единствен кандидат по обявения конкурс за заемане на академичната длъжност „Професор“, удовлетворяват и надхвърлят изискванията на закона и препоръчителните критерии на ФХФ на СУ. Приносите ѝ са неоспорими и ясно различими в научната общност.

Анализът на цялостната ѝ научноизследователска работа, научно-организационна и педагогическа дейност ми дават основание с убеденост да подкрепя кандидатурата на Галя Костова Маджарова и да препоръчам на членовете на уважаемото научно жури по провеждане на конкурса и на членовете на ФС на ФХФ да ѝ присъдят академичната длъжност „Професор“ в професионално направление 4.2. Химически науки за научна специалност „Теоретична химия – Изчислителна химия“.

Дата 11.07.2022 г.

Гр. София

(Проф. Константин Балашев, дн)