

## РЕЦЕНЗИЯ

на материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“, по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия), обявен в „Държавен вестник“, бр. 21 от 15.03.2022 г. (стр. 138) за нуждите на Факултета по химия и фармация (ФХФ) при Софийски университет „Св. Климент Охридски“

Единствен кандидат в конкурса е **гл. ас. д-р Искра Зарева Колева**; Iskra Koleva; <https://orcid.org/0000-0002-4080-9846>; Author ID (Scopus): [56641286000](https://www.researchgate.net/profile/Iskra_Koleva/publications); [https://www.researchgate.net/profile/Iskra\\_Koleva/publications](https://www.researchgate.net/profile/Iskra_Koleva/publications)

*Обща характеристика на постъпилите материали и кандидата.*

Със заповед № РД-38-192/12.04.2022 г. на Ректора на СУ, проф. дфн Анастас Герджиков съм определена за член на научно жури за провеждане на конкурс за заемане на академичната длъжност (АД) «доцент» по професионално направление (ПН) 4.2. Химически науки (Теоретична химия). Представените материали от д-р Искра Колева за участие в настоящия конкурс са в пълно съответствие с изискванията на ЗРАСРБ и Правилника за неговото приложение, Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“ и Препоръчителните критерии за ПН 4.2. „Химически науки“ на ФХФ при СУ. Справката на посочените изисквания при заемане на АД „доцент“ показва, че кандидатката изпълнява необходимия минимум на всички показатели по групи (А, В, Г, Д, Ж) и събира 773 точки при общ изискван минимум 510 точки. Няма данни и не са постъпили сигнали за плагиатство по представените документи (научни трудове) за конкурса (съгл. чл. 26, ал. 4).

Искра Колева е родена на 21.11.1989 г. Висшето си образование завършва във ФХФ при СУ като придобива бакалавърска степен по „Компютърна химия“ през 2013 г. и магистърска степен по „Материалознание“ през 2014 г. През 2017 г. тя е удостоена с образователната и научна степен „доктор“ по ПН 4.2. Химически науки (Теоретична химия) след успешна защита на дисертационен труд на тема „Квантовохимично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид“, във ФХФ при СУ, под научното ръководство на проф. дхн Г. Вайсилов и доц. д-р Хр. Александров. С наличие на докторска степен, кандидатката изпълнява показател „А“ (50 т.). От 2017 г. д-р Колева е „главен асистент“ в Катедра „Фармацевтична и приложна органична химия“ на ФХФ при СУ и в резултат на последователното кариерно развитие в

областта на теоретичната химия тя има натрупан около 5 години трудов стаж по специалността. По време на нейното образование и научна кариера кандидатката провежда 5 краткосрочни специализации в Барселонски университет, Испания; участва в организирането на 1 международна конференция (7th FEZA) и 9 национални конференции по химия за студенти и докторанти; представя научни съобщения на 23 конференции и работни срещи в България и чужбина, участва в изпълнението на 8 национални и 3 международни проекта. През 2020 г., Искра Колева е удостоена с престижната национална стипендия „За жените в науката“ – програма на L'Oréal и ЮНЕСКО.

#### *Научно-изследователска дейност.*

В научната си кариера досега, Искра Колева е съавтор в 18 научни статии, публикувани в реферирани и индексирани списания в базата данни SCOPUS/Web of Science, от категория Q1 и Q2. Към момента на оформяне на документа, общият брой цитирания на публикациите (без автоцитирания на всички автори) е 182 и *h*-индекса е 7 (SCOPUS). Високата цитируемост на публикуваните резултати, предимно за периода 2017-2022 г. е доказателство за качеството и значимостта на изследванията, както и за международната разпознаваемост на научните колективи с участието на д-р Колева.

В настоящия конкурс, д-р Колева участва с **14 оригинални научни труда**, които изключват публикации от докторския ѝ труд. Всички статии са публикувани в реномирани международни списания с висок импакт фактор, напр. *Angewandte Chemie (IF 16.8)*, *Catalysis Today (IF 6.5)*, *Molecules (IF 4.9)*, *Materials Chemistry and Physics (IF 4.8)*, *Journal of Physical Chemistry C (IF 4.2)*, *Physical Chemistry Chemical Physics (IF 3.9)* и отразяват задълбочените научни изследвания и резултати по актуални теми. Разпределението на публикациите по квартали е както следва: 11 са публикувани в списания от категория Q1 и 3 - в списания от категория Q2. В 3 научни публикации от категория Q1, кандидатката е първи автор, което по неписано правило е отредено на водещите в изследването учени. Научните трудове са публикувани в сравнително кратък период 2018 – 2022 г. (с изключение на една статия от 2015 г.), което свидетелства за изключително интензивна и задълбочена научно-изследователска дейност на кандидатката след докторантурата ѝ. Подбраните от д-р Колева публикации са с приноси в теоретичния хетерогенен катализ и квантовохимичното моделиране на периодични системи за изследване на структурата и свойствата на метални кълъстери, наночастици, редуцируеми оксиди и зеолити. Статиите

съответстват тематично на конкурса по НС „Теоретична химия“ и напълно отговарят на изискванията за заемане на АД „доцент“ по група показатели „В“ - 100 т. за 4 научни статии с Q1 (мин. 100 т.) и „Г“ - 235 т. за 7 публикации с Q1 и 3 публикации с Q2 (мин. 220 т.).

*Хабилитационен труд.* В изпълнение на изискванията по конкурса за доцент, д-р Колева е представила хабилитационен труд на тема **„Квантовохимично изследване на хетерогенни каталитични системи съдържащи цериев диоксид и метални наночастици“** с обем 38 страници, обединяващи 4 публикации от група „В“. В него са включени теоретични изследвания върху 1) термичната стабилност, редуцируемост и каталитични свойства на  $\text{CeO}_2$ , дотиран с циркониеви йони, редкоземни елементи (итрий) и с отложени платинови клъстери и 2) каталитичната активност на благородни метали при включване на въглерод в подповърхностните слоеве. С умелото прилагане на теорията на функционала на плътността, базиран на изчисления с плоски вълни за периодични структури, д-р Колева предлага задълбочен подход на квантово ниво за обяснение на наблюдаваната каталитична активност на изследваните метални наночастици, както и за изясняване на факторите, които променят тази активност в определени реакции. Проведените теоретични изследвания имат принос за оптимизиране на редица индустриални процеси с включени реакции на окисление на CO до  $\text{CO}_2$ , изгаряне на метан, редукция на азотен оксид, окисление на пропан и нафтаден, изгаряне на сажди и др. и целят постигане на благоприятен икономически и екологичен ефект. Основните научни приноси и резултати, представени в хабилитационния труд могат да се обобщят както следва:

- Изучени са структурните свойства и редуцируемостта на цериево диоксидни системи, дотирани с цирконий в зависимост от размера на наночастицата ( $\text{Ce}_{40-n}\text{Zr}_n\text{O}_{80} \sim 1,5 \text{ nm}$  и  $\text{Ce}_{140-n}\text{Zr}_n\text{O}_{280} \sim 2,4 \text{ nm}$ ), концентрацията и типа на разпределение на дотиращите  $\text{Zr}^{4+}$  катиони. Изчислени са електронните енергии на възможните моделни системи и на базата на получената най-ниска енергия е предсказано най-предпочитаното заселване на  $\text{Zr}^{4+}$  йони, а именно в първия подповърхностен слой на наночастицата. Установена е ролята на  $\text{Zr}^{4+}$  за стабилността, редуцируемостта, кислородната мобилност и каталитичната активност на системата от  $\text{CeO}_2$ . Ефектът, който предизвиква  $\text{Zr}^{4+}$  е обяснен

с по-малкия му йонен радиус в сравнение с този на  $\text{Ce}^{4+}$  и генериращото по-силно електростатично поле. (публ. № 4)

- Детайлно е изследвано влиянието на итриевото ( $\text{Y}^{3+}$ ) дотиране върху локалната структура и кислородните ваканции на повърхността и в обема на цериево диоксидни наночастици с различни размери и форми. Предсказани са най-предпочитаните позиции на итриевия катион и кислородната ваканция на повърхността на  $\text{CeO}_2$ , докато за наночастиците не е намерена ясна тенденция. Установено е, че дотирането с  $\text{Y}^{3+}$  селективно улеснява образуването на кислородни ваканции на повърхността на  $\text{CeO}_2$ , но няма съществен ефект върху редуцируемостта на системата, заради близките йонни радиуси на  $\text{Y}^{3+}$  и  $\text{Ce}^{4+}$ . Резултатите показали отсъствие на предпочитана заселеност на  $\text{Y}^{3+}$  и кислородната ваканция и улеснена локална реорганизация между структури с близка стабилност и миграцията на кислорода в тези системи, водят до извода, че нанокмпозитите  $\text{CeO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$  са подходящи за каталитични приложения. (публ. № 13)

- Проследени са промените в локалната и електронна структура на системата на адсорбиран въглероден оксид върху платинови клъстери отложени върху редуцируем  $\text{CeO}_2$  и нередуцируем оксид,  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  (за сравнение). Установено е влиянието на типа носител върху електронната структура на Pt клъстери. Намерена е зависимост между размера на Pt клъстер ( $\text{Pt}_{10}$ ,  $\text{Pt}_{20}$  и  $\text{Pt}_{25}$ ) и начина на координиране на молекула CO от една страна и адсорбционната енергия и плътността на състоянията на системата, от друга. Най-голяма адсорбционна енергия е предсказана за мостово координираната молекула CO върху най-големия  $\text{Pt}_{25}$  клъстер. Чрез изчисления на енергията на заетите d-състояния и на центъра на d-ивницата е оценена реактивоспособността на Pt клъстер (по отношение на електро-донорните свойства). Изчисленията са показали, че металният клъстер е по-реактивоспособен, когато е отложен върху  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  в сравнение с  $\text{CeO}_2$  и реактивоспособността на Pt клъстери намалява при адсорбцията на CO. (публ. № 6)

- Теоретично е изследвано свойството на подповърхностни въглеродни атоми да взаимодействат с медни, сребърни и златни повърхности и наночастици и по този начин да благоприятстват каталитичната активност на металните центрове, което отличава тези въглероди от обичайната им роля да отравят катализаторите. Установени са предпочетените подповърхностни позиции на C за Cu и Ag(111) повърхности и по ръбовете и ъглите на Au наночастици. С изчисления на електронната структура е

показано, че при свързване на металните йони с въглерод, енергията на вътрешните им електрони се стабилизира, което променя техните химични и каталитични свойства. Резултатите от енергетичните и кинетичните изчисления потвърждават индуцирания каталитичен ефект на подповърхностните въглеродни атоми при изследваните метали и показват, че по-скоро това е общо свойство за преходните метали, а не селективно за определени метални системи (Ni, Pd, Pt). (публ. № 10)

*Научни приноси на публикациите в група Г.* Научните теми и приноси, включени в публикациите в тази група могат да бъдат обобщени както следва:

**Квантовохимично моделиране на зеолити съдържащи метални катиони** (публ. № 2, 7, 8, 9, 12, 14). • Предсказани са най-вероятните структури на зеолит от тип MSE при образуване на силициева ваканция (дефект) и при заместването на Si с Ti или Al в различни кристалографски позиции. Предложен е вибрационен подход за установяване на T-позицията в Ti-MCM-68 зеолит чрез използване на молекули сонди - пиридин и ацетонитрил, адсорбирани при Ti център. Изучен е адсорбционният механизъм на водороден пероксид при Ti център в зеолитната решетка. • Предсказан е координационният полиедър на образувалите се метални комплекси на базата на изчислени вибрационни характеристики на дикарбонилни и нитрозилни и смесени карбонил–олефин моделни комплекси на Pd<sup>2+</sup> и Pt<sup>2+</sup> в шабазит и сравнени с експерименталните ИЧ спектри. • Изяснено е адсорбционното поведение на молекулата паракват върху зеолит тип фуказит (FAU) с различно съотношение Si/Al. В съгласие с експеримента е предсказано, че най-висок адсорбционен капацитет имат образци с най-голямо съотношение Si/Al (2.4). • Установена е относителната стабилност на различни Fe-съдържащи частици в порите на зеолит HZSM-5 и резултатите са спомогнали за изясняване на структурна информация от EXAFS изследването. • Подпомогнато е разработването на зеолитна структура тип шабазит, съдържаща значително количество диспергиран паладий за отстраняване на емисии от CO и NO. Моделирането на серия Pd<sup>x+</sup>(CO)<sub>m</sub>(NO)<sub>n</sub> комплекси в зеолита, изчисляване на вибрационните им характеристики и сравняване с експерименталните спектри са показали, че се образува смесен карбонил-нитрозилен паладиев комплекс в микропорите на зеолита, благодарение на който двата газа могат едновременно да бъдат напълно отстранени. • На базата на теоретична оценка на взаимодействието на хидропероксиди (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OOH и HOOH) и алкени (етен и цис-бутен)

с извънрешетъчно свързани метални катиони ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) в нанокристален зеолит с FAU тип решетка е изяснен процеса на забавяне на окислението на палмовото масло в присъствие на нанокристали от зеолита. Предсказано е, че зеолитът съдържащ  $\text{Ca}^{2+}$  възпрепятства най-ефективно окислението на палмовото масло.

**Квантовохимично моделиране на органични молекули с модифицирани мезопорести силикалити** (*публ. № 3, 5, 11*). С DFT изчисления на моделни системи е изяснен начина на взаимодействие между лекарствени средства като милтефозин, тамоксифен, куркумин и силикалитния носител, модифициран със силанолни, amino или карбоксилни групи. Оценена е термодинамичната стабилност на моделните системи, което дава възможност да се подбере подходящият носител на лекарството.

**Квантовохимично моделиране на взаимодействието на тривалентни метални катиони с кукурбитурили** (*публ. № 1*). С помощта на изчислените Гибсови енергии на образуване за моделните комплекси на  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$ ,  $\text{In}^{3+}$ ,  $\text{La}^{3+}$ ,  $\text{Lu}^{3+}$  с кукурбитурили  $\text{CB}[n]s$  ( $n = 5, 6, 7$  и  $8$ ) е оценено влиянието на размера на кухината на макроцикъла, средата (вакуум и воден разтвор), рН на средата и участието на хидратирани лантанидни катиони върху термодинамичната стабилност на комплексите.

Трябва да се признае, че изследователският подход за теоретичното охарактеризиране на метални многокомпонентни периодични системи с отчитане на примеси, среда и адсорбент не е тривиален заради големия брой атоми, спиново състояние на смесени метални системи, състояние на повърхността и обема и др. С изпълнение на тези задачи д-р Колева демонстрира дълбоки познания по химия на твърдото тяло и хетерогенния катализ, умело прилагане на усвоените изчислителни подходи за моделиране на периодични структури като показва отлична интуиция за всеобхватност на използваните модели при решаване на различни по характер изследователски предизвикателства. Това ѝ дава възможност да се включва успешно в интердисциплинарни изследвания на колективи с разнообразни научни интереси и с помощта на квантовохимични изчисления да извежда зависимости между структурата и свойствата на метал-съдържащи системи.

В изпълнение на минималните изисквания за АД „доцент“ (група показатели Д и Ж), кандидатката докладва наукометрични данни само върху статиите, представени за конкурса: по група „Д“ - **308** т. на базата на 154 цитата (без самоцитати на всички автори),

(мин. 70 т.); по група „Ж“ – 80 т., с отчитане на *h*-индекс 6 (60 т.) и участие в 4 проекта (20 т.), (мин. 70 т.). Учебно-преподавателската дейност на д-р Колева за периода 2017-2022 г. включва провеждане на упражнения по 6 програми с годишна учебна заетост над 370 ч.: „Компютърни методи в спектроскопията“, „Хибридни (QM/MM) методи“, „Моделиране на периодични системи и наноструктури“ - магистърска програма (МП) Изчислителна химия (МП Съвременни спектрални и хроматографски методи за анализ); „Фармацевтичен анализ I и II част“ и „Биофармация“ – МП Фармация; *Инструментални методи в химията II част* - бакалавърска програма (БП) Инженерна химия и съвременни материали. Д-р Колева е ръководител на успешно защитил дипломант, магистърска степен през 2020 г. и е рецензент на редица дипломни работи.

В заключение, научните приноси, публикационната и учебно-преподавателската активност и участието в научни проекти на гл. ас. д-р Искра Колева доказват, че тя е високо квалифициран и перспективен учен, способен да провежда оригинални научни изследвания в областта на изчислителното материалознание, по-специално теоретичен хетерогенен катализ, което напълно отговаря на научната специалност „Теоретична химия“ на конкурса. **Представеният анализ на материалите по конкурса ми дава основание за положителна оценка като убедено гласувам с „да“ и препоръчвам на Научното жури да предложи на Факултетния съвет на ФХФ при СУ, гл. ас. д-р Искра Зарева Колева да бъде избрана на академичната длъжност „доцент“ във ФХФ при СУ по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Теоретична химия“.**

11.07.2022

гр. София

Рецензент:

Ивелина Георгиева, проф. д-р, ИОНХ-БАН