

СТАНОВИЩЕ

на материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“, по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия-Изчислителна 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 **доц. д-р Галя Костова Маджарова**; Galia Madjarova; <https://orcid.org/0000-0002-6786-2719>; Author ID (Scopus): 6602638896; <https://www.researchgate.net/profile/Galia-Madjarova>; Web of Science ResearcherID: A-9124-2013

Обща характеристика на постъпилите материали и кандидата. Със заповед № РД-38-169/28.03.2022 г. на Ректора на СУ, проф. д-р Анастас Герджиков съм определена за член на научно жури за провеждане на настоящия конкурс. Представените материали от доц. д-р Галя Маджарова за участие в конкурса 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 (АД) 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 „професор“ показва, че кандидатът изпълнява необходимия минимум за всички показатели по групи (**А, В, Г, Д, Е, Ж**) и събира **1009** точки при общ изискван минимум **760** точки. Няма данни и не са постъпили сигнали за плагиатство по представените документи (научни трудове) за конкурса (съгл. чл. 26, ал. 4).

Галя Маджарова е родена на 07.11.1972 г. Висшето си образование завършва във ФХФ при СУ с магистърска степен по „Химична физика и теоретична химия“ през 1995 г., а през 1999 г. тя придобива образователната и научна степен „доктор“ по ПН 4.2. Химически науки (Теоретична химия). С наличие на докторска степен, кандидатът изпълнява показател „А“ (**50 т.**). В резултат на последователното кариерно развитие в областта на теоретичната химия, тя заема академичните длъжности асистент, главен асистент и от 2013 г. е доцент в Катедра „Физикохимия“, Лаборатория по квантова и изчислителна химия на ФХФ при СУ като има натрупан 21 години трудов стаж по специалността. Доц. д-р Маджарова е регистрирана в Регистъра на академичния състав в Република България, поддържан от Националния център за информация и документация (<https://ras.nacid.bg/dissertation-preview/16716>), където са налични данни за ОНС „доктор“ и академична длъжност „доцент“. По време на научната си кариера тя провежда 9 специализации в Германия, Великобритания, Франция и Япония. Проектната дейност на доц. Маджарова е впечатляваща, участва в изпълнението на 32 проекта и представя научни съобщения на 63 конференции и работни срещи. Кандидатът има натрупан богат административен опит като зам.-декан по учебната дейност; член на Факултетен съвет на ФХФ, Общото събрание на СУ, Университетската учебна комисия на СУ; отговорник на направление „Физикохимия и молекулно моделиране“ за специалност „Химия“ и председател на учебния съвет на специалност „Фармация“.

Научно-изследователска дейност. Доц. д-р Г. Маджарова е съавтор на **41** научни статии, **31** от тях публикувани в индексирани списания в базата данни SCOPUS/Web of Science. Към момента на оформяне на документа, общият брой цитирания на публикациите (без автоцитирания на всички автори) е 339 и *h*-индекса е 12 (SCOPUS).

В настоящия конкурс, доц. Г. Маджарова участва с **една монография и 11 оригинални научни публикации**, които изключват тези от докторския ѝ труд и конкурса

за доцент (2013 г.). Всички статии са публикувани в реферирани списания с висок импакт фактор, напр. *Journal of Chemical Theory and Computation* (IF ~6), *Journal of Molecular Liquids* (IF 5.1), *Physical Chemistry Chemical Physics* (IF 3.6), *The Journal of Physical Chemistry B* (IF 3.2) и отразяват задълбочени научни изследвания в областта на теоретичната химия. Научните трудове са с приноси в моделиране на структури и свойства на различни системи чрез методите на изчислителната химия, съответстват тематично на конкурса по НС „Теоретична химия“ и напълно отговарят на изискванията за заемане на АД „професор“ по група показатели „В“ - 100 т. за хабилитационен труд - монография (мин. 100 т.) и „Г“ - 257 т. за 9 публикации в списания от категория Q1, 1 - с Q2 и 1 - с Q4 (мин. 220 т.).

Хабилитационен труд. В изпълнение на изискванията на конкурса за професор, доц. Маджарова е представила хабилитационен труд-монография на тема „*Дизайн на нови твърди магнитни материали без използването на редкоземни елементи*“ с обем 92 страници. С изключителна задълбоченост са анализирани магнитните характеристики и функционалните свойства, определящи капацитета на магнитните материали за приложения в индустрията. Очертана е световната необходимост от разработване на нови твърди магнити с използване на евтини и достъпни суровини, без редкоземни елементи (РЕ) и с висок коефициент на рециклиране. Монографията има принос в разработване на два теоретични подхода за моделиране на магнитни системи без РЕ и изчисляване на магнитните им характеристики като средство за предсказване на нови перспективни магнити и насочване на синтеза им. С помощта на спин-поляризирана теория на функционала на плътността и изчисления на подбрани периодични хексагонални Fe_2YZ и Co_2XY ($Y = Ni, Fe (Co), Pt$; $Z = Al, Ga, Ge, In, Sn$) Heusler структури са изведени корелации между магнитните моменти, спин-орбиталното взаимодействие на атомите в трите позиции, общия брой валентни електрони, обема на елементарната клетка от една страна и общия магнитен момент, намагнитването при насищане M_s и магнитокристалинната анизотропия, от друга. Предложени са две хексагонални структури на Fe_2CoIn и Fe_2CoGa като алтернатива на магнитните материали с РЕ. Вторият подход, базиран на методите на машинното обучение е разработен и валидиран за качествено и полу-количествено предсказване на общия магнитен момент на елементарната клетка на произволна структура от зададени емпирична формула и обем на елементарната клетка. Обученият модел дава възможност за бърза оценка на магнитния момент на голям брой хипотетични системи и ефективно може да насочи експерименталните и квантовохимичните изследвания към най-перспективните системи.

Трябва да се признае, че изследователският подход за теоретичното охарактеризиране на магнетизма на метални многокомпонентни периодични системи не е тривиален заради отчитане на спин-орбитално взаимодействие, спинова поляризация, възможна магнитна подредба, достатъчен голям гريد от k-точки и др., калибриране на параметри на кристалната структура и валидиране на метода. С изпълнение на тези задачи доц. Маджарова демонстрира дълбоки познания по химия на твърдото тяло и магнетизма, и умело прилагане на изчислителни подходи за моделиране на магнитни периодични структури и на машинното обучение.

Авторска справка. Доц. д-р Г. Маджарова е представила и кратка авторска справка за научните приноси в публикациите, включени в група показатели „Г“. Авторската справка е изготвена компетентно и отразява адекватно научните приноси на кандидата, като те могат да се разделят в три основни групи според вида на изследваните системи:

- В осем публикации (1, 4, 3, 7-11) изследванията са насочени към моделиране на биологично значими структури – система от бионосител (съставена от глицеролмоноолеат и вода в хексагонална мезофаза), стабилизиращ агент трикаприлин и моделен биотовар – лизозим; агрегати на соли на жлъчните киселини в разтвор; система за транспорт на лекарства, включваща насочващ лиганд-носител (фолат или антифолати) и α -фолатен рецептор (FR α) (като мишена на лекарството за лечение на рак). Неоченими са резултатите от изчисленията, с оглед на възможността да се обяснят експерименталните данни, да се разкрият механизмите на взаимодействие между компонентите в изследваните системи и да се предложат оптималните структури и условия.
- Методологично изследване на оптичните спектри за молекулни кристали и 1D-полимер с прилагане TDDFT “bootstrap kernel” формализъм за пресмятане на диелектричната функция и оценка на надеждността на метода (2).
- Моделиране на магнитните свойства на постоянни магнити без RE в структурата. Изследването е фокусирано върху стабилни тетрагонални и хексагонални Heusler структури и оценка на енергията на магнитокристалинната анизотропия чрез изчисляване на спонтанната намагнитеност (5, 6).

За целите на изследванията са използвани квантовохимични и молекулнодинамични изчисления. Трябва да се подчертае, че използваните модели и изчислителни методи са подбрани, така че максимално да възпроизведат експерименталните системи и процеси.

В изпълнение на минималните изисквания за АД „професор“ (група показатели Д и Ж), кандидатът докладва наукометрични данни само върху статиите, представени за конкурс: по група „Д“ - 172 т. на базата на 86 цитата (без самоцитати на всички автори), (мин. 120 т.); по група „Е“ – 270 т. за ръководство на 6 и участие в 11 национални проекта, и членство в 2 международни проекта (мин. 150 т.), по група „Ж“ – 160 т., с отчитане на *h*-индекс 12 (120 т.), въведен нов курс, ръководство на 2-ма дипломанти (магистърска степен) и съ-ръководство на 2-ма дипломанти (бакалавърска степен) (мин. 120 т.). Учебно-преподавателската дейност на доц. Маджарова включва разработване и провеждане на 6 лекционни курса и 6 практически занятия с годишна учебна заетост между 598 и 931 ч.

В заключение, научните приноси, публикационната и учебно-преподавателската активност и участието в научни проекти на доц. д-р Галя Маджарова доказват, че тя е високо квалифициран и утвърден учен в областта на теоретичната химия, което напълно отговаря на научната специалност “Теоретична химия-Изчислителна химия“ на конкурса. Представеният анализ на материалите по конкурса ми дават основание за положителна оценка като убедено гласувам с „да“ и препоръчвам на Научното жури да предложи на Факултетния съвет на ФХФ при СУ, доцент д-р Галя Костова Маджарова да бъде избрана на академичната длъжност „професор“ във ФХФ при СУ по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Теоретична химия-Изчислителна химия“.

20.07.2022

гр. София

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