

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурса за академичната длъжност „Професор“ по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия) към Факултета по химия и фармация на СУ „Св.

Климент Охридски“, обявен в Държавен вестник бр. 105 от 11.12.2020 г.,

с кандидат доц. д-р Петко Стоев Петков

от проф. дхн Тодор Минков Дудев

Факултет по химия и фармация на Софийския университет

В конкурса за професор по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия) към Факултета по химия и фармация на Софийския университет участва само един кандидат – доц. д-р Петко Стоев Петков. За участие в конкурса кандидатът е представил пълен комплект от документи в съответствие с изискванията на Правилника за прилагане на Закона за развитието на академичния състав в Република България и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“.

Биографична справка

Доцент Петко Петков е възпитаник на Химическия факултет на СУ „Св. Кл. Охридски“, където през 2002 г. получава образователната степен бакалавър по Физикохимия и теоретична химия, а през 2004 - магистърска степен по Изчислителна химия. През 2009 г., под ръководството на проф. Г. Вайсилов, успешно защитава докторска дисертация на тема “Влияние на неметални атоми върху свойствата и реакционната способност на малки никелови кълъстери - изследване с теорията на функционала на плътността”. Професионалната си кариера започва през 2009 г. като асистент към катедрата по Органична химия на ХФ на СУ, където последователно израства до главен асистент (2010 г.) и доцент (2018 г.). Специализирал е в реномирани научно-изследователски центрове като Техническият университет в Мюнхен, Германия (2004 и 2006 г.), Университета Якобс, Бремен, Германия (няколко специализации между

2009 и 2016 г.), Лайпцигския университет, Германия (2016/2017 г.) и Техническият университет в Гданск, Полша (2018 г.).

Наукометрични данни

За конкурса доц. Петков е представил 21 научни труда, от които 20 публикации в специализирани издания, върху които са забелязани 235 независими цитирания, и 1 хабилитационен труд. Всичките статии, които не са били включени в конкурса за доцент, са публикувани в реферирани международни издания с висок импакт фактор (сумарен IF = 155.83) които, с изключение на една работа, попадат в квантил 1. Заслужава да се отбележат статиите, отпечатани в Nat. Mater. (IF = 31.03), Nat. Commun. (IF = 12.12), Angew. Chemie - Int. Ed. (IF = 11.73), Small (IF = 11.46) и J. Mater. Chem. A (IF = 11.30). Преобладаващият брой публикации (18) са изработени в сътрудничество с чуждестранни учени. Като цяло, доц. Петков е съавтор на 52 публикации (в 8 от тях е първи автор), чиито резултати са цитирани 912 пъти в научната литература. Индексът на Хирш на кандидата е 13. Резултатите от изследванията на доц. Петков са били представени (с устни доклади и постери) на 20 национални и международни научни форуми. Ръководил е / ръководи изследователски екипи в Българско-Френско-Японски консорциум, финансиран по програмата EIG CONCERT-Japan, в проекта MOF-Switches, финансиран от DFG, Германия и проекта BG05M2OP001-2.009-0028 финансиран по оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“ на Европейските структурни и инвестиционни фондове на ЕС. Участвал е като член на организационния комитет в провеждането на няколко национални и международни научни конференции. От направената от кандидата справка се вижда, че той покрива (и в редица случаи надхвърля значително) минималните национални изисквания за академичната длъжност професор по чл. 26 от ЗРАСРБ за научна област 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, както и препоръчителните критерии на ФХФ.

Научни приноси

Изследванията на доц. Петков са насочени към теоретичното моделиране на структурата, електронните свойства и спектралните отнасяния на химични/биохимични обекти от интерес за електрониката, фармацевцията и медицината. Могат да бъдат обобщени в следните направления:

1. *Моделиране на структурата и електронните свойства на координационни и органични полимери.* Серия от статии и хабилитационният труд са посветени на изследвания на структурата и свойствата на метал-органични рамки (MOP; metal-organic frameworks), формиращи комплекси с различни по размер и форма пори. Акцентът е върху MOP с подвижна кристална решетка (“дишащи” MOP), които имат способността да отварят и затварят своите пори при промяна на външните условия. Детайлният анализ, проведен чрез използване методите на теорията на функционала на плътността върху наскоро синтезирания от немски учени обект DUT-8(Ni) демонстрират, че динамиката на порите се определя от конформационната изомерия на лигандите (нафтален дикарбоксилатни лиганди) в комплекса. Оценени са термодинамичните параметри на преходите между отворена и затворена форма на порите. Получените резултати показват, че структурното проектиране на затворени метал-органични рамки, при които нелинейната форма на лигандите води до максимизиране на дисперсионните взаимодействия между тях, могат да бъдат използвани като средство за насочено проектиране на MOP с голяма подвижност в кристалната решетка. Последващи спектрални изследвания демонстрират, че нискочестотните вибрации на решетката играят решаваща роля в процеса на фазово преобразуване на гъвкави MOP. Изследвани са и ефектите на различни метални катиони и органични лиганди върху динамиката на порите в изследваните структури.

Обект на теоретично моделиране са и електронните свойства на серия от спрегнати двумерни MOP с електропроводящи свойства. Изграждането на тримерни структури в резултат на стиковане между двумерните такива се явява определящ фактор за проявената електропроводимост. Квантово-химичните изчисления показват начина на стиковане на двумерните слоеве. Изчислена е зонната структура и плътността на състоянията в системата, които са в добро съответствие с експерименталните

наблюдения. Определена е и ефективната маса на зарядовите носители. Работата очертава слоестите спрегнати МОР като нов клас полупроводникови материали с обещаващи потенциални приложения в спинтрониката, което обуславя публикуването на научните резултати (статии 3 и 12) в престижните списания на Nature.

Квантово-химични изчисления са използвани също така за изясняване на структурата на квази-двумерен слой от полианилин. Теоретичните моделирания, в комбинация с налични експериментални данни, определят на атомно ниво най-вероятната структура на изследвания обект.

2. Моделиране на взаимодействието на лекарствени молекули с мезопорести материали и биополимери. Изследванията, чрез комбинирано използване на експериментални и теоретични методи, са посветени на изучаване на взаимодействието между лекарствени средства (куркумин, кварцетин, доксорубицин, верапамил, милетфозин) и материали-носители на активното вещество в организма-приемник (мезопорести наночастици и биополимери). Изследвани са различни фактори, които влияят върху термодинамиката на взаимодействието между партньорите. Очертани са параметрите, благоприятстващи в най-голяма степен разпознаването между лекарствената молекула и носителя.

3. Квантово-химично моделиране на спектрални характеристики на молекули или клъстери в различно обкръжение. Спектралните и фотофизични свойства на серия от молекули/клъстери са изследвани с набор от теоретични подходи. Установени са (в детайли) вътрешномолекулните механизми, отговорни за наблюдаваните спектрални отнасяния.

4. Изследване на подвижност на йони с метода на ab-initio молекулна динамика. Проведени са симулации с методите на молекулната динамика с цел проследяване на атомно ниво на механизмите на взаимодействието на биогенни катиони (Na^+ и Mg^{2+}) с РНК. Оценена е подвижността на металните йони, както и техните места на координиране и афинитет спрямо РНК.

Учебно-преподавателска дейност

Доц. Петков е утвърден и уважаван преподавател във Факултета по химия и фармация с висока репутация сред студентите и колегите. Разработил е и води лекционни курсове по Молекулно моделиране на материали, Хибридни QM/MM методи, Увод в програмирането на “Linux“ обвивка, Квантово-химично моделиране на органични системи, както и семинари/упражнения по Органична химия I и II,

Приложна квантова химия, Молекулно моделиране на материали и Квантово-химично моделиране на органични системи. Бил е научен ръководител на 4 успешно защитили дипломанта и един пост-докторант (текущ).

Заклучение

Представените от кандидата публикации и хабилитационен труд са по темата на конкурса и представляват оригинални научни разработки със значителен принос в областта на теоретичната химия и молекулно моделиране. Приложените материали ми дават основание убедено да смятам, че кандидатът е водещ учен в своята област с дълбоки познания и практически умения в областта на теоретичната химия. Демонстрира отлично владение на набор от state-of-the-art изчислителни подходи, което му позволява да изследва на високо научно ниво сложни молекулни системи с нетривиална структура и термодинамични характеристики. Получените резултати носят иновативен характер (доказателство са серията публикации във високоимпактни списания) и могат да се причислят към категорията новости в научното дирене. Кандидатът демонстрира зрялост, творческо мислене и умение да подбира и решава успешно задачи с висок импакт за науката и практиката.

В заключение, в резултат на гореизложеното, считам убедено, че със своята научно-преподавателска дейност доц. д-р Петко Стоев Петков напълно отговаря на всички изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност „Професор“. Предлагам доц. д-р Петко Стоев Петков да бъде избран за Професор по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия) във Факултета по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“.

02.04.2021 г.

Подпис:



(проф. дхн Тодор Дудев)