

## РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Соня Върбанова Илиева,  
Факултет по Химия и Фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“  
на материалите, представени за участие в конкурс  
за заемане на академичната длъжност ‘професор’

в професионално направление **4.2. Химически науки (Теоретична химия – Изчислителна химия)**  
във Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“

В конкурса за ‘професор’, професионално направление **4.2. Химически науки (Теоретична химия – Изчислителна химия)**, обявен в Държавен вестник бр. 21 от 15.03.2022 г. като единствен кандидат участва **доц. д-р Галя Костова Маджарова**, катедра Физикохимия, ФХФ на СУ.

### Общо представяне на получените материали

Представените от доц. д-р Галя Маджарова материали по конкурса **отговарят на всички изисквания** на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСПБ) и на съответните Правилници за прилагането му (вкл. тези на СУ и ФХФ). Кандидатът отговаря и на критериите на ФХФ за заемане на академичната длъжност “професор”.

Доц. Маджарова е публикувала общо 42 научни труда (над 330 цитирания, h индекс 12), като за участие в настоящия конкурс е представила **11 публикации в научни списания (86 цитата) и 1 монография**, които не повтарят представените по други конкурси за заемане на академични длъжности и придобиване на научни степени. Представените за конкурса публикации се разпределят по съответните квартали както следва: 9 – Q1; 1 – Q2; 1 – Q4.

Представена е **монография** на тема „Дизайн на нови твърди магнитни материали без използването на редкоземни елементи“. Изложението на научните резултати в монографията е съпроводено от дискусия за мястото на научните изследвания в съответната научна област като цяло и принася им при разрешаване на конкретна проблематика в областта.

Представена е авторска **справка за научните приноси** на трудовете на кандидата. В справката са дискутирани в стегнат и ясен вид основните научни приноси на доц. Маджарова.

### Кратки биографични данни

Г. Маджарова е завършила висше образование като Магистър по химия със специализация Химична физика и теоретична химия в Химически факултет на СУ „Св. Кл. Охридски“ през 1995. През 1999 г. защитава докторска дисертация на тема „Строеж на едномерни полимери с магнитни свойства“, след което продължава научната си и преподавателска работа в катедрата по Физикохимия на ХФ като асистент (до 2002 г.), старши асистент (2002-2005) и впоследствие гл. асистент (2005-2013), а от 2013 г. заема академичната длъжност доцент. Следователно натрупаният професионален и научен опит на доц. Маджарова е изцяло свързан с обявения конкурс.

От документите по конкурса се вижда, че доц. Маджарова е провела научни визити и специализации в чуждестранни научни групи – Max Planck Institute of Microstructure Physics, Halle, Германия; University of Hull, Великобритания; Institute for Chemistry of Surfaces and Interfaces, Mulhouse, Франция; Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto, Япония; University of Leipzig, Германия. След тези визити съвместната работа с колегите от чужбина е продължила, което е видно от публикуваните в съавторство научни разработки.

Участвала е в редица национални и международни научни конгреси/конференции и изследователски/образователни проекти. Участвала е в 12 национални и 2 международни проекта; ръководител е на 6 проекта финансирани целево от държавния бюджет (ФНИ-СУ). Съръководител е на Лаборатория за моделиране и прогнозиране на процеси и свойства на материали за чисти технологии в ЦВП „Национален център по мехатроника и чисти технологии“

Преподавателската ѝ дейност е богата и разностранна: ръководител на 4 дипломанти, съръководител на 6 магистърски дипломни работи, научен консултант на 1 докторска дисертация и съръководител на 1 докторант, зачислен 2021 г., редовна преподавателска дейност във ФХФ. Понастоящем доц. Маджарова е зам. декан по учебната дейност – фармация и СДК във ФХФ.

#### **Обща характеристика на дейността на кандидата**

Цялостната научна дейност на кандидата е в областта на теоретичната химия, което напълно съвпада с областта и професионалното направление на обявения конкурс. Научните публикации, представени за участие в конкурса, отразяват работата на доц. Маджарова в **научно направление: моделиране на структура и свойства чрез теоретични методи – молекулно-динамични симулации и квантово-химични изчисления.**

Молекулно-динамични симулации са приложени за изследване на разнообразни структури, свързани с биологични процеси в организма, тяхната надмолекулна организация, процеси на агрегация, мицелообразуване, хидрофобни взаимодействия, формиране на водородни връзки, тавтомерни свойства и др. Разглежданите биологични процеси са свързани предимно с преминаване на молекулите през двойния липиден слой на клетъчната мембрана. Ето защо липидните системи са предмет на изследване в работата на Г. Маджарова и колектива, с който работи по тази тематика. Две от публикуваните научни статии (1 и 4) са посветени на една от най-интересните и обещаващи нови липидни системи – обърната хексагонална мезофаза, изградена от глицеролмоноолеат (моноолеин) и вода. Базираните на моноолеин HII мезофази са предмет на изследване в научната литература по отношение на техните структурните свойства и потенциалното им приложение при „контрол и управление“ на биоактивни макромолекули като лизозим и инсулин. В работите на Г. Маджарова и колектив е установена структурата на елементарната клетка. Изследвано е влиянието на добавен трикаприлин върху стабилността на структурата като е обяснено неговото стабилизиращо влияние върху системата. От особен интерес е способността на тези системи за самоорганизация, вследствие на което те могат да приемат молекули с по-големи размери (по-големи от диаметъра на канала), поради което са с потенциал за развитие и приложение в областта на drug delivery systems. Експерименталните проучвания са проведени от Prof. Garti, Hebrew University of Jerusalem, Israel.

В научната литература са публикувани редица изследвания на системи за доставка на лекарства на основата на фолат, но механизмът на свързване на лиганда или неговите производни с рецептора не е напълно известен на молекулярно ниво. В работите на доц. Маджарова са проведени изследвания на молекулната структура и динамика на фолат и антифолати, тавтомерното равновесие в разтвор за изомерите на фолат, охарактеризиран е фолатния рецептор чрез комбинирано приложение на експериментални и теоретични методи. Предложен е модел на клетъчна мембрана - бислои, изграден от различни липиди, който е приложен за изясняване на молекулния механизъм на свързване на три лиганда (фолат, ралтитрексед, метилтетрахидрофолат) към активния център. Изясняването на механизма на взаимодействие е приложено за обяснение на експериментални наблюдаеми - регистрираните разлики в афинитета на серията от лиганди към рецептора. В справката за приноси доц. Маджарова акцентира, че за първи път в литературата е представен толкова детайлно съставен атомистичен модел на клетъчна мембрана. Работата по тематиката е проведена от колектив. Галя Маджарова е участвала в целия процес на изследването.

Квантово-химични изчисления са приложени за теоретично разрешаване на някои физични проблеми при изучаване изменението и чувствителността на молекулни кристали към променливи електрични полета, TDDFT формализмът е приложен за пресмятане спектрите на възбуждане на различни материали, моделиране на магнитни свойства на постоянни магнити. Публикуван е нов подход за конструиране на нови твърди магнити чрез формиране на стекове от съществуващи бинарни магнити с цел повишаване на магнитната анизотропия като същевременно е направен опит за намаляване количеството на скъпия метал и замаяната му с по-евтин. Въз основа на този комбиниран подход са предложени няколко нови материала за твърди магнити с потенциално добри свойства.

В представената **монография** обект на обобщено разглеждане е търсенето на нови материали – твърди магнити, несъдържащи редкоземни елементи. Тематиката е особено актуална в светлината на значимостта на твърдите магнити в промишлеността от една страна и от друга – икономическите и политически проблеми, които добивът на редкоземни елементи поставя. Моделните системи, които са включени в изследването са от семейството на Heusler сплавите – сплави, притежаващи феромагнитни свойства, без да съдържат магнитни елементи. Проведено е квантово-химично моделиране на две серии Heusler сплави: чрез приложение на теорията на функционала на плътността (DFT) е пресметната електронната структура и основни характеристики на изследваните твърди магнити. Приложението на квантово-химични изчисления за охарактеризиране на магнетизъм не е тривиална процедура. В процеса на работа са разрешени някои предизвикателства, проведени са спин-поляризиращи изчисления, използвани са неколинеарни подходи, освен феромагнитна подредба са изследвани и антиферомагнитни състояния и е създаден протокол за изчисляване и подробен анализ на свойствата на материали - твърди магнити. От изследваните системи е определена структура, за която изчислените характеристики са оптимални и в този смисъл може да се разглежда като потенциален кандидат за реализиране на твърд магнит.

Втората част на монографията е посветена на изследване на връзката между състава на структурите и техните магнитни свойства с цел получаване на количествена зависимост, която да се използва за изчисляване (предсказване) на характеристики на магнитни системи по теоретичен път. Наличието на бази данни за моделиране на твърди магнити е ограничено. В монографията е направен преглед на наличните бази данни като след сравнителен анализ е използвана базата данни Materials Project. Приложен е Decision tree метод за класифициране на данните. Тъй като при извеждане на модела всъщност не са използвани данни от проведените квантово-химични изчисления, бих искала да попитам дали е обмислян и търсен вариант за количествен модел структура-активност, при получаването на който да се използват данни от квантово-химичните изчисления?

От представените публикации е видно, че доц. Маджарова от една страна е продължила изследванията върху моделиране свойства на магнитни системи като ги е разширила и обогатила, а от друга страна се е включила в разработването на нови тематики като приложение на молекулно-динамични симулации за изследване на структурна организация и динамика на свързване на лекарствени комплекси с рецептори; приложение на методите на машинно обучение за охарактеризиране на връзки структура-състав-свойства. В работата си е установила ползотворно **сътрудничество** с колеги от ФХФ-СУ; групата на prof. Gross, Max Planck Institute of Microstructure Physics, Halle, Германия, Prof. Garti и колеги от Hebrew University и др.

Бих искала да подчертая **интердисциплинарния характер на научната дейност** на доц. Маджарова, което се потвърждава от гореизложеното и същността на публикуваните научни разработки. Фокусът на изследванията е бил върху теоретичните изчисления, но в съответствие с експерименти, съпътстващи изследвания и потенциал за приложение в различни научни области. Бих искала специално да отбележа доста разширената палитра от теоретични методи и програмни продукти, използвани в научните изследвания на разнообразни обекти. Това според мен е най-силното доказателство за непрекъснатото научно израстване на Г. Маджарова и в този смисъл заемането на длъжността професор е естествен резултат в нейното развитие.

В представените за конкурса 11 научни статии Г. Маджарова е водещ автор (автор за кореспонденция), заедно с проф. Анела Иванова, в 2 от публикациите. Средният импакт фактор на публикациите е 3.4, като варира от 1.472 (*European Biophysical Journal with Biophysics Letters*) до 6.006 (*Journal of Chemical Theory and Computation*). Отбелязани са 86 цитирания на публикациите в научната литература.

*Забележка:* смятам, че при представяне списък на публикации е необходимо главният автор(и) (авторът за кореспонденция) да бъде отбелязан (например със символ звезда), както е прието и утвърдено в научната литература. Това всъщност се обуславя и от препоръчително изискване No 2 на ФХФ (*Кандидатът да е водещ учен в определено научно направление, демонстрирано чрез поне 5 публикации, в които той е първи автор или автор за кореспонденция*).

Проведените изследвания и публикуваните резултати имат подчертано **научни и научно-приложни приноси** в съответните области на науката. Приносите могат да се формулират като

доказване с нови средства на съществени нови страни на вече съществуващи научни области, проблеми, теории, хипотези; създаване на нови методологии за анализ; получаване на нови факти. Тези приноси се потвърждават от авторитетните международни научни списания, в които са публикувани статиите, както и от **цитиранията им в научната литература**. Общият брой цитирания е над 330, 86 от които са на публикациите, представени за настоящия конкурс. Следователно, научната дейност на доц. Маджарова е в актуални области на научното познание, с проблематика, намираща широк отзвук в научната литература и постигнатите резултати имат определен научен принос.

Научните резултати са представени с участия в национални и международни научни форуми с постери и доклади на доц. Маджарова или нейни колеги от групата. За периода 2013-2020 доц. Маджарова е участвала в доклади, представени на 17 научни конференции, 4 от тези доклади са изнесени от нея.

**Учебно-педагогическата дейност** на кандидата е изключително наситена и разнообразна. Лектор е на курсовете по Строеж на веществото за студенти от две специалности, ОКС Бакалавър, Молекулно моделиране на материали (специалност ИХСМ, ОКС Бакалавър), Теоретична химия (специалност КХ, ОКС Бакалавър), Квантова химия и молекулна механика (специалност Химия, ОКС Бакалавър), Приложна изчислителна химия (специалност Изчислителна химия, ОКС Магистър). От приложената справка се вижда, че има средна годишна аудиторна заетост над 350 часа, а за академичната 2021/22 това число възлиза на 525. Била е ръководител на 4 дипломни работи и както беше отбелязано, понастоящем е съръководител на 1 докторант. Бих искала да подчертая компетентността, отзивчивостта и колегиалния подход в работата на доц. Маджарова.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Въз основа на представените за конкурса материали и научни трудове, гореизложеня анализ на тяхната значимост и съдържащите се в тях научни приноси, както и на моето лично мнение за кандидата като ерудиран учен, убедено давам своята **положителна оценка** и препоръчвам на Научното жури да изготви доклад-предложение до ФС на ФХФ за избор на **доц. д-р Галя Костова Маджарова** на академичната длъжност '**професор**' във ФХФ на СУ по професионално направление 4.2. Теоретична химия – Изчислителна химия.

19.07.2022 г.

Рецензент:

*/проф. Соня Илиева/*