

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Васил Борисов Делчев, кат. Физикохимия, ПУ "П. Хилендарски"
на материали, представени за участие в конкурс за заемане на АД "професор"
в СУ "Св. Климент Охридски"

Област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика
Професионално направление 4.2. Химически науки
Научна специалност: Теоретична химия.

Кандидат: доц. д-р Петко Стоев Петков, ФХФ, СУ

Съобщение за конкурса: *Държавен вестник* 105 / 11.12.2020 г.

Заповед на Ректора на СУ за определяне състава на научното жури: РД-38-10/07.01.2021г.

Решение на първото заседание на НЖ: да изготвя рецензия.

Материалите по конкурса са налични във файлов формат в електронната система *Elearn* на СУ. Те съдържат: 1) автобиография; 2) дипломи за ОНС „доктор“ и висше образование; 3) свидетелство за заемане на академичната длъжност „доцент“ във ФХФ на СУ; 4) удостоверение за заемани длъжности във ФХФ на СУ; 5) списък с всички публикации и тези по текущия конкурс; 6) списък с цитиранията по конкурса и файл с приносния характер на трудовете; 7) хабилитационен труд; 8) страница с обявата от *Държавен вестник*.

Биографични данни

Доц. Петков, завършва бакалавърска степен в СУ "Св. Климент Охридски" през 2002 г., като съгласно приложената автобиография, специалността е "Физикохимия и теоретична химия". Две години по-късно (2004) доц. Петков се дипломира по магистърската специалност "Изчислителна химия" във ФХФ на СУ. Обучението си завършва със защита на дипломна работа. През 2009 г. д-р Петков защитава дисертационен труд на тема „Влияние на неметални атоми върху свойствата и реакционната способност на малки никелови клъстери - изследване с теорията на функционала на плътността" в Химическия факултет на СУ по научната специалност „теоретична химия". Защитата е пред СНС при ВАК. В подадените по конкурса материали не открих кой е научният ръководител на д-р Петков, но направената справка в НАЦИД показва, че това е проф. дхн Г. Вайсилов от ФХФ на СУ.

През 2018 г. кандидатът е избран на АД „доцент“ във ФХФ при СУ, където работи до настоящия момент. В периода 2009 – 2018 г. той заема последователно академичните длъжности „асистент“ и „главен асистент“. За избора му на тези позиции е приложено удостоверение от отдел „Човешки ресурси“ на СУ. Вижда се една последователност и надграждане в академичното израстване на доц. Петков, което говори за изграждане на една пълноценна академична личност, достатъчно подготвена за научна и преподавателска дейност в солидна академична институция каквато е ФХФ на СУ.

Научна дейност

Показател	А	Б	В	Г	Д	Е	Ж
1	50	-	100	220	120	150	120
2	50	-	275	320	470	210	182

1 – Съгласно минималните национални критерии и препоръчителните критерии на ФХФ при СУ за професионални направления 4.2. "Химически науки" и 7.3. "Фармация".

2 – Доц. д-р Петко Стоев Петков, ФХФ, СУ.

В таблицата са сравнени показателите от минималните национални критерии за заемане на АД „професор“, препоръчителните критерии на ФХФ при СУ и тези на кандидата доц. д-р Петков.

Научни трудове

Кандидатът доц. д-р Петков участва в конкурса за заемане на академичната длъжност „професор“ с 20 научни публикации, деветнадесет от които са публикувани в списания с квартали Q1 и една публикация в списание с квартал Q2. Седем от публикациите са представени по показател В от минималните национални изисквания за заемане на АД „професор“, всички с квартали Q1, а импакт факторът им е 74,556. Броят на точките от представените статии по този показател е 175. Държа да отбележа, че кандидатът е приложил също хабилитационна теза, която се оценява с допълнителни 100 точки. Така по показател В общият брой на точките е 275. Предполагам, че кандидатът е отбелязал 175 точки, тъй като публикациите, които е представил по показател В са включени в библиографията на хабилитационния труд! Въпреки това считам, че хабилитационният труд трябва да бъде оценен с 100 точки! Той е от 38 страници, на английски език, със заглавие „*Computational modeling of the framework flexibility and electronic properties of metal-organic frameworks*“. В него са цитирани 58 литературни източника, девет от които са публикации на кандидата. Две публикации са извън посочените по показател В.

По показател Г кандидатът представя 13 научни публикации, дванадесет от които са с квартали Q1 и само една е с квартал Q2. Сумарният импакт фактор на списанията, в които са отпечатани материалите е 81,277. Както е известно, високият импакт фактор е следствие от научния престиж на списанията. Безспорно отбелязаният импакт фактор показва висока значимост на научните изследвания, проведени от доц. д-р Петков. Повечето от публикациите са с големи авторски колективи, което е указание за многостранността на изследванията. Приносите от изследванията на кандидата са най-общо към теоретично изясняване на структури и взаимодействия между материални системи.

По статиите, представени в комплекта с документи се открояват следните, обобщени от доц. д-р Петков приноси:

1) *Геометрична структура и свойства на координационни и органични полимери.* Изучена е структурата на „дишащи“ метал-органични рамки от полимери с органични лиганди и метални йони, които са изградени от пори с променящи се размери в зависимост от външните въздействия. Резултатите са систематизирани в статии № 2, 13, 14, 17 и 20 (номерацията следва тази от приложения списък със статии по конкурса). Направените изследвания са съвместно с експерименталната група на проф. Стефан Каскел от ТУ-Дрезден, изпълнени в рамките на общ проект, който продължава в настоящия момент. В статия № 2 е показано, че нискочестотните трептения в рашетката играят съществена роля при фазовото преобразуване на подвижни метал-органични рамки. В статия № 14 е доказано, с помощта на теорията на функционала на плътността, че колективната гъвкавост на порите се контролира от конформационната изомерия на лигандите. Оценена е свободната енергия на завъртане на лигандите и следствията от това движение с мета-динамика. С *ab initio* молекулна динамика е доказано, че нискочестотните трептения в Рамановите спектри на някои структури, например DUT-8(Ni), са свързани с трептене по диагоналите на порите на рашетката, което е в пряка зависимост с отворената и затворената ѝ форма.

Чрез експериментални (в групата проф. Ш. Фенг - ТУ-Дрезден) и квантовохимични изследвания е изучена електронната структура и магнитните свойства на двумерни метал-органични рамки. Резултатите са описани в статии № 3 и 12. Установени са полупроводникови свойства на една от структурите. Предложена е молекулната структура на квази-двумерен филм от полианилин (с помощта на

теорията на функционала на плътността). Изследванията показват п-п стековане по ръбовете на припокриване на отделните полимерни вериги (статия № 11).

2) *Теоретични изследвания на взаимодействията на лекарствени молекули с мезопорести материали и биополимери.* Изучени са взаимодействията на лекарствени молекули като кверцетин, куркумин, верапамил, милтефозин и доксорубицин с мезопорести материали и биополимери като носители (статии № 4, 9, 10, 19). Те са мотивирани от експериментални изследвания, проведени в ИОХЦФ – БАН. Коментирани са енергетични и структурни величини (начин на свързване, енергия на свързване и др.), при които лекарствените форми се усвояват в най-голяма степен от организмите.

3) *Теоретични изследвания на спектрални характеристики на молекули и клъстери в различно обкръжение.* Теоретично са изследвани спектралните характеристики и възбудените състояния на определени молекулни системи и клъстери. Например при изучаване на системата $\text{Ba}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ и други кристални образци е показано, че *steady-state* и *time-resolved* спектралната информация на кристалните системи, съчетана с теоретични пресмятания допринася за изясняване на основните релаксационни процеси в тях (статия № 5). При 3-диетилфосфонокумарина е показано, че времената на живот на първите възбудени синглетни състояния зависят от вида на халогена на шеста позиция (статия № 16). Предложена е нова класификация на повърхностните нитрати за процеса адсорбция на $\text{NO} + \text{O}_2$ върху адсорбент от цериев диоксид (статия № 18).

4) *Изследване на подвижността на йони с ab initio молекулна динамика.* Изследван е начинът на свързване на алкални и алкалоземни метални йони с йонизирани групи на РНК в разтворител вода. Доказано е, че Na^+ са значително по-подвижни от Mg^{2+} при свързването им към фосфатните групи на РНК. Освен това натриевите йони се координират обратимо към РНК. Резултатите са обобщени в обзорната статия № 6. С помощта на *ab initio* изчисления за BN_3 и MoS_2 са изучени механизмите на дифузия на протони и протий. Доказано е прескачане между съседни слоеве само на протий, което е в съгласие с някои експериментални наблюдения (статия № 15).

В допълнение към приносите са изследвани 18 хетерогенно каталитични системи с преходни метали като Pd, Pt, V, Co, Cu и др. Направена е класификация на металите и техните соли според токсичността им върху различни живи организми (риби, водорасли, плъхове), като е показано, че най-благоприятните каталитични компоненти са рутений, желязо и молибден.

Цитирания

Кандидатът участва в конкурса за заемане на АД „професор“ с 235 цитирания. Те са разпределени по статии както следва: статия №1 – 46 цитирания, статия №2 – 14 цитирания, статия №3 – 84 цитирания, статии №4 и 14 – с по 5 цитирания, статии №5 и 15 – с по 1 цитиране, статия №6 – 11 цитирания, статии №10 и 13 – с по 2 цитирания, статия №7 – 3 цитирания, статия №8 – 9 цитирания, статия №9 – 7 цитирания, статия №11 – 17 цитирания, статия №12 – 28 цитирания, всички налични в базата SCOPUS. Цитиранията са от последните години, което означава, че те не повтарят такива, използвани от доц. д-р Петков в преходни негови процедури. Така за показател Д в документите по процедурата са отбелязани 470 точки. Съгласно базата SCOPUS индексът на Хирш на доц. д-р Петков е 13.

Изяви в научни форуми и проекти

Доц. д-р Петков е докладвал резултатите от своите изследвания на 20 научни форума. Изнесъл е 12 секционни доклада и е представил 8 постера. Би било добре, ако беше дадена повече информация за типа на конференциите – кои от тях са национални и кои международни.

По показател Е кандидатът е представил списък с проекти, в които той е член на нучния колектив или ръководител. Съгласно списъка доц. Петков е член на колектива на 12 проекта, повечето финансирани от Фонд „Научни изследвания“ на МОН, а три от тях са по оперативни програми на Европейския съюз. Три са участията на кандидата като член на научен колектив в международни проекти. Посочен е един международен проект с Япония, в който доц. д-р Петков е ръководител на българската изследователска група. Общата сума на привлечените средства от кандидата по проекти е 150 000 лв. Не видях негови участия в инициативи по програмата ERASMUS на Европейския съюз!

Учебно-преподавателска дейност

От приложените документи се вижда, че доц. д-р Петков е дългогодишен преподавател във ФХФ на СУ, ръководител на лекционни курсове, семинарни и лабораторни упражнения. Кандидатът е разработил три изцяло нови лекционни курса: „Молекулно моделиране на материали“, „Увод в програмирането на Linux обвивка“ и „Квантовохимично моделиране на органични системи“. Доц. д-р Петков е изнасял лекции още по дисциплините „Органична химия“ и „Хибридни QM/MM методи“.

Доц. д-р Петков е ръководил на семинарни и лабораторни занятия по „Органична химия“ I и II част и практичните занятия по: „Увод в програмирането на Linux обвивка“, „Молекулно моделиране на материали“, „Приложна квантова химия“ и „Квантовохимично моделиране на органични системи“. Последните два практични курса са разработени от кандидата. Това е завидна преподавателска кариера, която съгласно подадената справка от СУ, започва от назначаването на доц. Петков на академичната длъжност асистент във ФХФ на СУ през 2009 г. В подкрепа на всичко казано е справката за аудиторна заетост на кандидата, която показва годишна натовареност от около 500 уч. часа, като за текущата година тя е 680 уч. часа.

Доц. д-р Петков е самостоятелен ръководител на два дипломанта, които са разработили дипломни работи по негови научни тематика – в областта на теоретичната химия. На две дипломни работи той е съръководител с проф. Г. Вайсилов и с проф. Томас Хайне. Това са дипломните тези на Искра Колева и Radu Borgs, последната защитена в Университета Якобс, Бремен, Германия. Въпреки, че няма защитили докторанти, кандидатът удовлетворява препоръчителните критерии за АД „професор“ във ФХФ на СУ, като представя равностоен брой защитили дипломанти. Това е отчетено в показател Ж на минималните национални изисквания и критериите на ФХФ. По този показател доц. д-р Петков прилага също две статии с методична насоченост, които са отпечатани в сп. „Химия“.

Бих препоръчал на доц. д-р Петков в близко бъдеще да се ангажира с ръководството на един или повече докторанти. С професионалния опит, който той притежава и неговите международни контакти съм убеден, че ще бъдат защитени успешно множество докторски тези по теоретична химия под негово ръководство!

Сред документацията по конкурса не намерих информация за публикувани учебни материали (на хартия или електронни) от доц. д-р Петков. В тази връзка бих препоръчал на кандидата да участва активно в разработване на учебно-методична литература, например по съставените от него лекционни курсове или практични занятия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените материали по конкурса за академичната длъжност „професор“ отговарят на изискванията на ЗРАС в РБ, правилниците за неговото прилагане и препоръчителните критерии на ФХФ на СУ. Кандидатът е изпълнил, а по някои

показатели дори преизпълнил минималните национални изисквания в професионалното направление на конкурса. Той е изграден учен и преподавател и не се съмнявам, че успехите му ще продължат и в бъдеще. В тази връзка давам своята **положителна оценка** за кандидатурата на доц. д-р Петков и препоръчам на колегите от Научното жури да предложат на Факултетния съвет на ФХФ на СУ да избере доц. д-р Петко Стоев Петков на академичната длъжност “професор” в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика; професионално направление: 4.2. Химически науки; научна специалност: теоретична химия.

05.04.2021 г.
гр. Пловдив

Изготвил рецензията: