

РЕЦЕНЗИЯ

от доц. д-р Галя Костова Маджарова

председател на научното жури по конкурса за доцент по направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия) към катедра Фармацевтична и приложна органична химия при Факултета по химия и фармация на Софийския Университет “Св. Климент Охридски”, обявен в ДВ бр. 21/15.03.2022г.

В конкурса участва един кандидат - гл. ас. д-р Искра Зарева Колева. Кандидатът е представил всички изисквани по закона документи и материали.

Гл. ас. Искра Колева е възпитаник на ФХФ при СУ “Св. Кл. Охридски”. През 2012 г. завършва с отличен успех бакалавърска степен, специалност “Компютърна Химия”, а през 2014 г. с пълно отличие магистърска програма „Материалознание“. От 2014 г. до 2017 г. е докторант в Катедрата по Органична химия и фармакогнозия към ФХФ на СУ, с научни ръководители проф. дн Г. Вайсилов и проф. д-р Хр. Александров. През 2017 г. успешно защитава дисертация на тема „Квантово-химично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид“ и придобива ОНС „Доктор“. От 2017 г. е назначена за главен асистент в катедрата по Фармацевтична и приложна органична химия. В периода 2018-2020 г. провежда пет краткосрочни специализация в Барселонския университет в Испания, където е установила успешно сътрудничество, видно от публикациите на кандидата. За постигнатите научни резултати, през 2020 година д-р Искра Колева печели наградата „За жените в науката“ – програма на L'Oréal и ЮНЕСКО.

Гл. ас. И. Колева е съавтор на **18** научни публикации, две от които са включени в дисертационния труд за придобиване на ОНС „Доктор“. В настоящия конкурс участва с **14** публикации, като хабилитационният труд е базиран на **4** от тях (11 публикации – Q1 и 3 публикации – Q2). Забелязаните цитати по работите в конкурса са **154**, а общият брой на цитиранията върху всички работи е **168**. Всички статии, представени за участие в конкурса, са публикувани в международни списания с импакт фактор, а **2** от тях са в списания с импакт фактор **по-голям от 15.0**. Хирш индексът на д-р И. Колева към момента на подаване на документите е **h=6**. След придобиване на ОНС „Доктор“ участва в **3** национални и **1** международен проект. Гл. ас. И. Колева е представила своите научни резултати на **14**

национални и международни форума. Тя има и личен опит в организиране на национални и международни конференции като: FEZA 2017 - Конференция на федерацията на европейските зеолитни асоциации; Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2013-2022.

Научноизследователска дейност:

Научните изследвания на кандидата са фокусирани в областта на квантовохимично моделиране на системи, използвани в хетерогенния катализ и лекарство-доставящи системи на основата на мезопорести силикати.

В материалите по конкурса гл. ас И. Колева представя хабилитационен труд „Квантовохимично изследване на хетерогенни каталитични системи съдържащи цериев диоксид и метални наночастици ” в обем от 37 страници, в който са обобщени резултатите от работи [4,6,10 и 13]. Част от изследванията са естествено продължение на тематиката на докторантурата. Систематично е проследена промяната на каталитичните свойства на CeO_2 при дотирането му с цирконий и итрий [4,13]. Разгледани са различни модели на наночастици, за да се установи влиянието на размерите на частицата и подробно са описани модели с различни позиции на дотиращите йони. Моделните системи на CeO_2 са усложнени с отлагане на Pt клъстери и наночици, върху които са адсорбирани молекули CO [6]. За сравнение са пресметнати модели на Al_2O_3 , с отложени върху него платинови наночастици. Работа [10] е посветена на ролята на въглерода в хетерогенните каталитични процеси. Хабилитационният труд описва същината на проведените изследвания и откроява оригиналните резултати, които са постигнати.

Представените за участие в конкурса работи, извън хабилитационния труд, могат да се разделят в няколко подобласти.

- Квантовохимично моделиране на зеолити, съдържащи метални катиони - публикации № 2,7,8,9,12,14

Наличието на метални йони в различни зеолитни структури повлиява силно каталитичната им активност. Използвайки теория на функционала на плътността е подпомогната интерпретацията на експерименталните структурни данни и са предложени механизми, по които протичат процесите.

Публикации [7, 12] са посветени на зеолити с малки пори от тип шабазит и атомно диспергирани Pt и Pd, които имат потенциално приложение за пасивно адсорбиране на азотни оксиди и CO. Тези моделни системи са използвани, за да се изследва и разбере влиянието на преходните метали в микропорести материали. Показано е, че изследваният материал може да се използва за едновременно отстраняване на CO и NO_x, като е изяснен механизмът на действие. Изследванията по тази тема са намерили широк отзвук в научната общност.

Публикация [2] изучава теоретично стабилността на структури с различни позиции на Ti, комбинирани с наличието на дефекти (силанолови гнезда) в Ti-MCM-68 зеолита, който може да активира водороден пероксид. Чрез оценка на относителната стабилност на силаноловите гнезда и заместването на Si с Ti или Al в различни кристалографски позиции е описана каталитичната способност на изследваната зеолитна система. Моделирана е и адсорбцията на малки органични молекули в зеолита и е оценено влиянието на силициевите ваканции върху каталитичните способности.

Комбинирани експериментални и теоретични изследвания в статия [8] изучават взаимодействието на хербицида параквант с образци на зеолит NaY с различни съотношения на Si/Al и големина на порите. Моделирането показва предпочитаното разположение на молекулите на параквант в структурата на зеолита, което подпомага разбирането на наблюдаваните резултати за абсорбционното поведение на изследваните зеолитни системи.

В публикация [9] са моделирани различни желязо-съдържащи HZSM-5 зеолити и е изяснява относителната стабилност на различни Fe-съдържащи катиони в порите на зеолита. Получените заключения са подкрепени от експерименталните резултати и обясняват наблюдаваната температурна еволюция.

Изследване [14] анализира способността на катион обменени зеолити, съдържащи алкални и алкалоземни метални йони (Li⁺, Na⁺, K⁺ и Ca²⁺), свързани извънрешетъчно, да подобрят стабилността на палмовото масло спрямо термична обработка и окисление. Квантовохимичните пресмятания на моделните системи обясняват експерименталните наблюдения и показват, че металните йони предпочитано улавят пероксида, което забавя окислението на палмовото масло.

- Квантовохимично моделиране на лекарство-доставящи системи, базирани на модифицирани мезопорести силикати (публикации № 3,5,11)

Публикация [5] е комбинирано изследване на лекарство-доставяща система базирана на магнитни силкатни наночастици, която има способността за целенасочена доставка на лекарствата в организма. Охарактеризирането на получените наночастици и взаимодействието им с тамоксифен дава обещаващи резултати. Теоретичното моделиране показва, че водородните връзки между лекарството и модифицираните повърхности са ключови за стабилността на адсорбционните комплекси. По-малки по-размер и начин на приготвяне, отново магнитни силикати мезопорести системи са охарактеризирани в работа [3] и е изследвано взаимодействието им с милтефозин. Изяснен е механизмът на адсорбция на лекарствената молекула.

Публикация [11] характеризира взаимодействието на куркумин с наночастици от мезопорест силикат, допълнително функционализиран с amino-групи. Наночастиците са изследвани като потенциални лекарство-доставящи системи. Изследването е комплексно и съвместява множество експериментални методи за анализ и теоретично моделиране. Предложена е структура на най-стабилните комплекси и на молекулно ниво е изяснен начинът на координиране на куркумина.

- Квантовохимично моделиране на взаимодействието на тривалентни метални катиони с кукурбитурили (публикация №1).

Теоретичното изследване изяснява механизма на формиране на комплекси между тривалентните йони (Al^{3+} , Ga^{3+} , In^{3+} , La^{3+} , Lu^{3+}) и кукурбитурили. Обсъдена е структурата и термодинамичната стабилност на моделните системи и са очертани ключовите фактори за повишаване на водоразтворимостта на макроцикличната система.

Представените за рецензия научни трудове отговарят на тематиката на конкурса и са в областта на теоретичната изчислителна химия. Съществена част от научните публикации на гл. ас. д-р Искра Колева се отличават с работа в сътрудничество с експериментални групи. Проведените изследвания обогатяват научното познание, като изясняват структурата на изследваните системи и предлагат материали с подобрени свойства или нови функционалности.

Учебно-преподавателска дейност: Гл. ас. Колева преподава в бакалавърски и магистърски програми на ФХФ. В *бакалавърското ниво* води упражнения по *Инструментални методи в химията* II част (сп. „Инженерна химия и съвременни материали“). В *магистърско ниво* води упражнения в маг. програма „Изчислителна химия“ в следните курсове: „Хибридни QM/MM методи“, „Моделиране на периодични системи“ и наноструктури и „Компютърни методи в спектроскопията“. В специалност „Фармация“ води упражнения по „Фармацевтичен анализ“ I и II част и „Биофармация“

Гл. ас. И. Колева е била научен ръководител на една магистърска дипломна работа. Учебната натовареност на д-р Колева показва сериозна ангажираност в образователния процес в катедрата и факултета. Работата и със студентите намира положителни отзиви в анкетите, които студентите попълват в края на всеки семестър.

Гл. ас. Искра Колева е отговорен колега и личните ми впечатления от нея са отлични.

Заклучение

Кандидатът в конкурса за доцент, гл. ас. д-р Искра Колева, е активен изследовател в областта на теоретичната химия с научна продукция, изцяло фокусирана в професионалното направление на конкурса.

Представените материали съответстват напълно както на всички изисквания от Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“, така и на допълнителните, препоръчителни за професионално направление 4.2 „Химически науки“ на Факултета по химия и фармация. Въз основа на гореизложеното считам, че гл. ас. д-р Искра Зарева Колева напълно удовлетворява условията за заемане на академичната длъжност „доцент“.

Убедено давам своята положителна оценка и препоръчвам на Факултетния съвет на Факултета по химия и фармация при Софийски Университет „Св. Климент Охридски“ да присъди на гл. ас. д-р Искра Зарева Колева академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия).

11.07.2022 г.

Рецензент:

(доц. д-р Галя Маджарова)