

Становище

върху представените материали на гл. асист. д-р Искра Зарева Колева за участие в конкурса за доцент по Теоретична химия към катедра Фармацевтична и приложна органична химия, Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, обявен в ДВ бр. 21/2022 г., от проф. дхн Борис Симеонов Гълъбов

Искра Зарева Колева придобива висше образование – бакалавърска степен по специалност „Компютърна химия“ през 2012 г., а година по-късно и магистърска степен по „Материалознание“ във Факултета по химия и фармация. През периода 2014-2017 г. е редовен докторант по теоретична химия под ръководството на проф. дхн Георги Вайсилов. Успешно защитава докторската си дисертация и от 2017 година е главен асистент към катедрата по Фармацевтична и приложна органична химия, ФХФ. Дисертацията и е на тема „Квантово-химично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид“. Гл. асист. Искра Колева е публикувала досега общо 18 научни труда, изцяло в утвърдени международни научни списания. Участва в конкурса с 14 научни публикации. 11 статии са в списания от квартал Q1, а останалите 3 в списания от квартал Q2. Тези факти подчертават солидното научно ниво на трудовете на кандидата. Научните публикации са цитирани 154 пъти в специализираната литература за последните няколко години. Участвала е с устни доклади или постери в 23 научни конференции. Участвала е като член на работния колектив в десет национални и европейски научни проекти. През периода 2017 – 2022 година е ангажирана в учебно-преподавателска работа и ръководи практически и семинарни занятия към шест курса в областите фармацевтичен анализ, биофармация, инструментални методи в химията и теоретично моделиране в химията.

Изпълнени са всички показатели на минималните изисквания за получаване на научното звание „доцент“, като по повечето показатели точките са надвишени. Всички по-горе дискутирани данни свидетелстват, че кандидатурата на гл. асист. Искра Колева напълно съответства на държавните изисквания, както и на специфичните изисквания на Софийския университет за областите химия и фармация.

Научните приноси на кандидатът са в областта на теоретичното моделиране на твърдофазни материали – зеолити, силикалити, каталитични системи съдържащи цериев диоксид – тяхното взаимодействие и модифициране с метални катиони и органични молекули. Освен това са проучени и охарактеризирани наночастици на

преходни метали, както и host-guest взаимодействието на метални йони с кукурбитурилни макроцикли. Трябва да се подчертае, че в повечето научни трудове теоретичните пресмятания на Искра Колева са тясно свързани с провеждани от съавтори експериментални проучвания, целящи охарактеризиране на свойствата и взаимодействията на важни за технологиите каталитични системи. Използвани са надеждни методи на теорията на плътностния функционал, съчетани с базисни набори описващи достатъчно точно изследваните системи и взаимодействия. Ето защо получените резултати и направените изводи корелират много добре с наличните експериментални данни, а също така направените теоретични предсказания са солидно обосновани. Всяка от публикациите представлява самостоятелен научен интерес за химията и физиката на изследваните сложни системи. Не случайно, публикациите на Искра Колева са във водещи в областта на химията международни научни списания.

Научните приноси на гл. асист. Искра Колева са впечатляващи. Ще подчертая само няколко.

- Показано е чрез теоретично моделиране, че подповърхностни въглеродни частици са интегрална част от наночастици на металните повърхности за Pd, Ni, Pt, Cu, Au и Ag. Въглеродните структури могат да формират частичен положителен заряд, от значение за каталитичните свойства на тези метали (*Angew. Chem.* 2019).

- Чрез периодични изчисления са изяснени промените в електронната структура и геометрията на платинови кълстери и наножици при тяхното отлагане върху повърхността на оксиди както и при адсорбция на въглероден оксид (*Catal. Today*, 2019).

- Стабилността на цериево диоксидни наночастици като функция от количеството на циркониеви добавки е изяснено чрез периодични DFT изчисления (PCCP, 2020).

- Преведени от кандидата теоретични изчисления показват механизма на формиране и охарактеризиране на свойствата на суперелектрофилни метални катиони в Pd/SSZ-13 зеолит. Този резултат е новост в литературата. Показано е убедително, че паладиевите йони в зеолита са под формата на суперелектрофилни Pd²⁺ йони, идентифицирани преди това

в литературата като Pd³⁺ и Pd⁴⁺ йони. Разнообразни експерименти доказват теоретичните резултати (*J. Phys. Chem. C*, 2020).

Едно изследване, пряко насочено към използване в практиката, е проучването върху използване на атомно диспергиран паладий в зеолит SSZ-13. Този материал напълно елиминира отделяни CO и NO_x отпадни газове и е подходящ за приложение в автомобилни катализатори (*Angew. Chem.*, 2018).

Гл. асист. Искра Колева е отличен преподавател и се ползва с уважението на студентите. Тя се отнася с изключително внимание към преподавателската си работа. Предвижда се от следващия семестър да изнася лекции по Инструментални методи в химията. Всичко гореизложено ми дава основание да подкрепя присъждането на научното звание „Доцент“ по теоретична химия на гл. асист. д-р Искра Зарева Колева, една истински убедителна кандидатура.

24.06.2022 г.

Подпис:



/проф. дхн Борис Гълъбов/