

СТАНОВИЩЕ

от проф. д-н Соня Върбанова Илиева,
Факултет по Химия и Фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“
относно материалите, представени за участие в конкурс
за заемане на академичната длъжност ‘професор’,
професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия)
за нуждите на ФХФ, СУ „Св. Кл. Охридски“

В конкурса за ‘професор’, обявен в Държавен вестник, бр. 105 от 11.12.2020 г. като единствен кандидат участва доц. д-р Петко Стоев Петков, катедра Органична химия и фармакогнозия, ФХФ, СУ „Св. Кл. Охридски“.

Представените от доц. д-р Петко Петков материали **удовлетворяват и надвишават изискванията** на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и) и на съответните Правилници за прилагането му (вкл. тези на СУ и ФХФ). Кандидатът отговаря на допълнителните критерии на ФХФ за заемане на академичната длъжност “професор”. Доц. Петков има публикувани **общо 52 научни труда** (49 от тях в списания с импакт фактор, 2 в списания без импакт фактор, 1 глава от книга, над 900 цитирания, h индекс 13), като за участие в настоящия конкурс е представил **20 публикации в научни списания**, които не повтарят представените по други конкурси за заемане на академични длъжности и придобиване на научни степени. Впечатляващ е факта, че от представените за участие в конкурса 20 публикации, 19 попадат в квантил Q1 и една – в Q2.

Представен е **хабилитационен труд** на тема „*Computational modelling of the framework flexibility and electronic properties of metal-organic frameworks*“ и авторска **справка за научните приноси** на трудовете на кандидата. В справката са дискутирани в стегнат и ясен вид основните научни приноси на публикациите, с които доц. Петков участва в конкурса. Смятам, че при съставяне списъка на публикации е необходимо главният автор (авторът за кореспонденция) да бъде отбелязан (например със символ звезда), както е прието и утвърдено в научната литература.

П. Петков е завършил висше образование като Магистър по изчислителна химия в Химически факултет на СУ „Св. Кл. Охридски“ през 2004. 2009 г. защитава докторска дисертация на тема „*Влияние на неметални атоми върху свойствата и реакционната способност на малки никелови клъстери - изследване с теорията на функционала на плътността*“, след което продължава научната си и преподавателска работа в катедрата по Органична химия на ХФ като асистент и в последствие гл. асистент (2009-2018), а от 2018 г. заема академичната длъжност доцент. Следователно натрупаният професионален и научен опит на доц. Петков е изцяло свързан с обявения конкурс.

От документите по конкурса се вижда, че доц. Петков е провел редица специализации, краткосрочни и дългосрочни научни визити в чуждестранни научни групи като гост-изследовател, постдокторант, асистент, гост-професор, което без съмнение е обогатило значително научно-изследователския му опит. Участвал е в редица национални и международни научни конгреси/конференции и изследователски/образователни проекти. Преподавателската му дейност е

богата и разностранна и се изразява както в ръководството на дипломанти, обучение на докторанти, така и в редовна преподавателска дейност във ФХФ.

Цялостната **научна дейност** на кандидата е в областта на теоретичната химия, което напълно съвпада с областта и професионалното направление на обявения конкурс. Научните публикации, отразяват работата на доц. Петков в областта на изчислителната химия – развитие на методи на изчислителната химия и тяхното приложение за изследване структурата и свойствата на порести материали (зеолити, метал-органични решетки и др.), моделиране на спектрални характеристики на молекули, клъстери и материали, изследване динамиката на химични процеси.

От представените публикации е видно, че П. Петков е установил ползотворно **сътрудничество** с изследователски групи от Университета на Лайпциг - Wilhelm-Ostwald-Institute of Physical and Theoretical Chemistry, ТУ Мюнхен, ТУ Дрезден, Университета Якобс, Бремен, Германия, Университета на Барселона, Испания, Фармацевтичен факултет на Медицински университет, София, БАН. В резултат на съвместна работа са публикувани научните резултати от проведените изследвания:

- Моделиране на структурата и манипулиране на свойствата на „дишащи“ MOFs – изследванията са проведени съвместно с експерименталната група на проф. Каскел, ТУ Дрезден в рамките на текущо финансиран научен проект;

- Рационално проектиране на MOFs с голяма подвижност в решетката;

- Изследване динамиката на кристалната решетка на DUT-8(Ni) с Раманова спектроскопия и МД симулации;

- Модифициране на дишащите характеристики на DUT-8(Ni) при използване на други метални йон (Co^{2+} ; Zn^{2+}), както и в присъствие на два вида йони в кристалната решетка едновременно;

- Изследвания на слоести спрегнати MOFs с изразена структурна подвижност на кристалната решетка с потенциално приложение в електрониката и спинтрониката, публикувани в *Nature materials* и *Nature communications*;

- Доказване и охарактеризиране структурата и начина на стекване на слоести MOFs чрез квантово- химични изчисления, изследване промяната в електронната структура и магнитното състояние на метал-органичните структури при наличие на различни стекинг взаимодействия;

- Моделиране на взаимодействието на лекарствени молекули с мезопорести материали и биополимери – изследванията са проведени в сътрудничество с експерименталната група на проф. Маргарита Попова (ИОХЦФ-БАН). Охарактеризиране на вида, стабилността и локалната структура на адсорбираните лекарствени молекули върху носителя чрез квантово-химични изчисления;

- Моделиране на спектрални характеристики на молекули и клъстери в различно обкръжение чрез квантово-химични изчисления и МД симулации. Въз основа на теоретично изчислени вибрационни спектри са получени първите спектрални доказателства от спектри на фотодисоциация в инфрачервената област (IRPD) за високата вътрешна подвижност на двата пръстена в V^{13+} клъстер. Поради значимостта на направените фундаментални изводи, работата е приета в *Agewandte Chemie Int Ed.* и публикацията е поместена на корицата на списанието като *VIP* статия.

Представените за конкурса 20 научни труда са публикувани след 2017 г в изключително реномирани международни издания с подчертано висок импакт фактор. Средният импакт фактор на публикациите е около 8, като варира от 2.73 (*J. Drug Deliv. Sci. Technol.*) до 31.03 (*Nature Materials*). В повечето случаи те са резултат от работата на голям международен колектив, което разбира се е пряко свързано с мултидисциплинарния характер на научните изследвания. Доц. Петков е съкореспондиращ автор в една от тези публикации. Основният принос на П. Петков в представените публикации е провеждането на квантово-химични изчисления и МД симулации. Смятам, че той е утвърден специалист в областта на теоретичната химия: научните разработки и публикациите, в които е участвал са най-силното доказателство за неговото непрекъснатото научно израстване и в този смисъл заемането на длъжността професор е естествен резултат в неговото развитие.

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 – 235 цитата** за публикациите, участващи в настоящия конкурс (общ брой цитати – над 900). Следователно, научната дейност на доц. Петков 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 постери и доклади на над 20 национални и международни научни форуми. Доц. Петков е участвал в 11 национални и 3 международни **научни/образователни проекти**, като е бил ръководител на 2 научноизследователски проекти.

Учебно-педагогическата дейност на кандидата е наситена и разнообразна. Доц. Петков е лектор на няколко курса: *Органична химия* - за студенти от две специалности, ОКС Бакалавър, БФ на СУ, *Молекулно моделиране на материали* - за специалност ИХСМ, ОКС Бакалавър, ХФ, *Хибридни QM/MM методи*, *Увод в програмирането на „Linux“ обвивка*, *Квантово-химично моделиране на органични системи* - за магистратури ИХ и СМСАОС, ФХФ. Участва в преподавателската дейност на факултета и като водещ практически занятия (семинари и упражнения). Бил е ръководител на 4 дипломни работи. Макар че не е бил ръководител, той е обучил двама докторанти (Стефан Колев от ФХФ-СУ и Yun An от Университета в Лайпциг) в теоретичните основи и детайли по провеждане на *ab-initio* молекулна динамика и метадинамика. Понастоящем е ръководител на пост-докторант по програмата „Петър Берон и НИЕ“.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Въз основа на представените за конкурса материали и научни трудове, гореизложения анализ на тяхната значимост и съдържащите се в тях научни приноси, както и на моето лично мнение за кандидата като високо ерудиран учен, убедено давам своята **положителна оценка** и гласувам с „да“ за избор на **доц. д-р Петко Стоев Петков** на академичната длъжност 'професор' във ФХФ, СУ по професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).

16.04.2021 г.

Рецензент:

/проф. Соня Илиева/