

Рецензия

върху представените материали на доц. д-р Галя Костова Маджарова за участие в конкурса за професор по Професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия – Изчислителна химия), към катедра Физикохимия, Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, обявен в ДВ, бр. 21 от 15.03.2022 г., от проф. д-р Борис Симеонов Гълъбов

Галя Костова Маджарова придобива висше образование петгодишния курс по специалност „Химия“ през 1995 г. в Химическия факултет на Софийския университет. През 1999 г. защитава успешно дисертация в областта на изчислителната и теоретичната химия под ръководството на проф. Аля Таджер. От 2001 г. е асистент към катедрата по Физикохимия на ФХФ, по-късно старши асистент и главен асистент. През 2013 година е избрана за доцент. Доц. д-р Галя Маджарова е публикувала досега 40 научни статии и една монография, в голямата си част в утвърдени международни научни списания. Трудовете ѝ са цитирани над 330 пъти в специализираната литература. В конкурса за професор доц. Г. Маджарова участва с 11 публикации и наскоро издадената от Издателството на Софийския университет монография „Дизайн на нови твърди магнитни материали без използването на редкоземни елементи“. От представените научни трудове 9 са в списание от квартал Q1, а останалите две – в Q2 и Q4. Тези научни трудове, публикувани през периода 2014-2022 г. са цитирани общо 86 пъти. Кандидатът е представила като устни доклади и постери общо 69 доклада на международни и национални научни конференции. Участник е в 12 национални и два международни научни проекта. Била е ръководител на 6 научни проекта, финансирани от Софийския университет. Г. Маджарова е била на пост-докторантска специализация в Института по фундаментална химия, Киото, Япония, и на дългосрочна специализация в Макс-Планк Института по микроструктурна физика, Хале. Била на краткосрочни научни визита и в няколко западноевропейски лаборатории. Горепосочените данни очертават кандидатът в конкурса доц. Д-р Галя Маджарова като утвърден учен с научни трудове във водещи списания в областта на химията и солидна репутация в международната научна общност.

Доц. д-р Галя Маджарова е един от силно ангажираните преподаватели в областта на изчислителната и теоретична химия. През годините на академичната си кариера е участвала като лектор и ръководител на семинарни занятия в следните

курсове: Строеж на веществото, Теоретична химия, Молекулен дизайн, Молекулно моделиране на функционални материали, Квантова химия и молекулна механика, Приложна изчислителна химия и Квантова химия и спектроскопия. Отзивите от студенти и колеги към нейната преподавателска работа са отлични - тя е силно ангажиран и отдаден на професията си преподавател. През последните пет години Галя Маджарова надвишава изискваните 360 часа годишна учебна заетост, предимно лекции пред студенти от бакалавърска и магистърска степени.

Прегледът на представените в конкурса материали показва, че са изпълнени са всички показатели на минималните изисквания за получаване на научното звание „професор“, като по повечето показатели точките са надвишени. Всички по-горе дискутирани данни свидетелстват, че кандидатурата на доц. д-р Галя Маджарова напълно съответства на държавните изисквания за научното звание „професор“, както и на специфичните изисквания на Софийския университет за областите химия и фармация.

Научните изследвания на доц. Г. Маджарова са в областта на теоретичното моделиране с помощта на методи на изчислителната химия на разнообразни системи: изолирани молекули, полимери, сложни колоидни системи, твърдофазни материали със селективни магнитни свойства. Тези изследвания са изисквали приложението на най-разнообразни методи на компютърното моделиране: квантово-химични пресмятания, молекулна динамика, приложение на софтуер за периодични пресмятания при използване на теорията на плътностния потенциал, моделиране на взаимодействията биологично-активни лиганди с биорецептори. Всичко това свидетелства, че кандидатът в конкурса е с отлично теоретична и практическа методична подготовка в областта на конкурса.

Научните приноси в представените в конкурса научни публикации са в няколко направления, които ще разгледам последователно.

- С помощта на молекулно-динамично изчисления е изучена надмолекулната структура на мезофаза, съдържаща глицеролмоноолеат (GMO), трикаприн и вода. Изчисленията показват, че в тази сложна система се оформя като хексагонална структура, резултат на разнообразни междумолекулни взаимодействия. Този неочакван резултат илюстрира много добре ефективността на молекулната динамика като метод за проучване на

структурата, възможните преобразованията, а оттам и функциите на сложни физикохимични системи /публ. 1,4/.

- Много интересно е и проучването чрез приложение на молекулната динамика върху агрегацията на жлъчни киселини в среда, добре моделираща условията в стомашно-чревния тракт на човека. Разкрити са съществени фактори, способстващи агрегацията, както и механизмите свързани с тези процеси. Това проучване илюстрира много добре интереса на доц. Маджарова към проучвания, свързани с процеси в биологични системи. Получените резултати могат да се използват при създаване на подходящи методи и препарати за лечение.
- Централно място в проучванията на Г. Маджарова заема създаването на удачен модел на моделна неопластична мембрана, позволяващи проучването на механизмите на взаимодействие на противотуморни препарати с раковите клетки /публ. 7-11/. Създаден е удачен модел за описание на процесите на активен транспорт на лекарствени препарати към α -фолатен рецептор. Молекулно-динамичните проучвания илюстрират много надеждно сложните процеси и механизми на доставка на биологично-активните вещества и тяхното взаимодействие с рецепторите. И в тази серия от проучвания фокусът е върху важни за науката и медицината процеси. Може да се подчертае, че доц. Маджарова не се колебае да проучва най-сложни физикохимични и био системи, независимо от трудности в тяхното теоретично моделиране. Получените резултати са впечатляващи.
- Друга важна част на проучванията на доц. Маджарова са в областта на описанието и предсказването на свойствата на постоянни магнити без редкоземни елементи в структурата /публ. 5,6/. Тези проучвания заедно с изчерпателен литературен обзор са обобщени в монографията „Дизайн на нови твърди магнитни материали без използване на редкоземни елементи“, изд. СУ /публ. 12/. В тези трудове Г. Маджарова показва умения да работи върху моделирането на твърдофазни материали, още една област в изчислителната химия. Освен това проучванията обхващат и разработването на система за машинно обучение /machine learning/, целящо предсказване на магнитните свойства на нови материали въз основа на предварително

известни , както и на натрупаните в течение на процеса на моделиране данни. Получените резултати в тази област са много изчерпателни и илюстрират богатите възможности на изчислителната химия при охарактеризиране на сложни твърдофазни системи.

Доц. Галя Маджарова е много уважаван колега във Факултета по химия и фармация. Тя е ангажирана в административната дейност като заместник-декан по учебната работа за специалност „Фармация“ и за курсовете за следдипломна квалификация. Член е на Факултетния съвет на ФХФ. Председател е на учебния съвет на специалност „Фармация“, а също така и отговорник на направление „Физикохимия и молекулно моделиране“ за специалност „Химия“. Г. Маджарова е съ-ръководител на Лаборатория за моделиране и прогнозиране на процеси и свойства на материали за чисти технологии в Центъра за върхови постижения „Национален център по мехатроника и чисти технологии“.

Галя Маджарова бе основен двигател при инсталацията на компютърен клъстер във ФХФ. Тя е и администратор на клъстера. Доц Маджарова имаше ключова роля за успешното приложение на системата Moodle за онлайн обучение във факултета. Тя оказваше техническа помощ на редовните преподаватели и на външните лектори при използването на системата за онлайн обучение през периода 2020 – 2022 г.

Доц. Д-р Галя Маджарова е изявен учен с отличен международен престиж в областта на изчислителната и теоретичната химия. Изложените по-горе научни резултати и публикуването им във водещи научни списания в областта /девет публикации в списания от Q1 квартал от списъка с 11 представени в конкурса научни статии/ подчертават високото ниво на нейните проучвания. Качествата на кандидатът като преподавател и много активен участник в организирането и ръководството на учебната работа на ФХФ подчертават нейната значителна роля в цялостната дейност на факултета.

Всичко гореизложени ми дава основание убедено да препоръчам на уважавания Научен съвет на ФХФ да присъди научното звание „Професор“ по Професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия – Изчислителна химия), на доц. д-р Галя Костова Маджарова.

05.07.2022 г.

Рецензент:


/проф. дхн Борис Гълъбов/