

Рецензия

върху материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“ в област на висше образование 4. „Природни науки, математика и информатика“, професионално направление 4.2. „Химически науки“ (Теоретична химия – Изчислителна химия), обявен в ДВ, бр. 21 от 15.03.2022 г. за нуждите на Факултета по химия и фармация при Софийски университет „Св. Кл. Охридски“

Рецензент: проф. д-р Наташа Трендафилова, ИОНХ-БАН

Единствен кандидат в настоящия конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“ в професионално направление 4.2. „Химически науки“ (Теоретична химия – Изчислителна химия) е **доц. д-р Галя Костова Маджарова**, *ORCID: 0000-0002-6786-2719, Scopus Author ID: 6602638896, Web of Science ResearcherID: A-9124-2013.*

Представените от кандидатката документи са в съответствие с изискванията на ЗРАСРБ и Правилника за неговото приложение, Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“, както и с Препоръчителните критерии на ФХФ при придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности за професионално направление 4.2. „Химически науки“.

Справката за изпълнението на минималните национални изисквания по чл. 2б от ЗРАСРБ и тези на ФХФ-СУ за професионално направление 4.2. „Химически науки“, при заемане на академичната длъжност „професор“ показва, че доц. д-р Маджарова изпълнява и дори надвишава необходимия минимум.

Доц. д-р Галя Маджарова е възпитаник на Химическия факултет на Софийски университет „Св. Кл. Охридски“. Тя се дипломира в 1995 г. с квалификация „Магистър по Химия“ и специализация „Химична физика и теоретична химия“. През 1999 г., след успешна защита на дисертационен труд в ХФ на СУ, на Галя Маджарова е присъдена образователната и научна степен „доктор“ по „Теоретична химия“. В периода 2001-2013 г., тя е избирана последователно за „асистент“ (2001-2002), „старши асистент“ (2002-2005) и „главен асистент“ (2005-2013), а от 2013 г. заема академичната длъжност „доцент“ по „Теоретична химия“ към ФХФ на СУ. Едновременно с интензивната научно-изследователска дейност, доц. д-р Маджарова е лектор по Строеж на веществото (1998-), Теоретична химия (2003-2018), Молекулен дизайн (2003-), Молекулно моделиране на функционални материали (2012-), Квантова химия и молекулна механика (2016-), Квантова химия и спектроскопия (1998-2009) (за бакалаври) и Приложна изчислителна химия (за магистри).

Доц. д-р Маджарова е провела редица успешни и важни за оформянето на научния ѝ профил специализации: 5 изследователски визити в University of Leipzig, Германия (1996-1999), Post-doc в Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto, Япония (2000-2001), STSM в Institute for Chemistry of Surfaces and Interfaces, Mulhouse, Франция (2004), RS Incoming Short Visit

Grant в University of Hull, Hull, Великобритания (2005) и гост-изследовател в Max Planck Institute of Microstructure Physics, Halle (Saale), Германия (2014-2015).

Неразделна част от научната и преподавателската дейност на доц. Маджарова е активното ѝ участие в научно-изследователски проекти: 12 национални и 2 международни, била е ръководител на 6 проекта, финансирани от ФНИ-СУ. Понастоящем тя е съ-ръководител на Лаборатория за моделиране и прогнозиране на процеси и свойства на материали за чисти технологии в ЦВП „Национален център по мехатроника и чисти технологии“. В периода 2001-2012 г., кандидатката е била научен консултант на 6 магистърски дипломни работи и 1 докторска дисертация, рецензент на 5 магистърски дипломни работи, работила е с кръжочници в Лабораторията по Квантова и изчислителна химия. След 2012 г. тя е научен ръководител на 2 бакалавърски и 2 магистърски дипломни работи и научен съ-ръководител на 1 докторант.

През последните години, доц. д-р Маджарова участва много активно в академичния живот и в управлението на ФХФ-СУ. Административната ѝ ангажираност включва: заместник декан по учебната дейност за фармация и СДК (от 2019 г.), член на Факултетния съвет на Факултета по химия и фармация, председател на учебния съвет на специалност „Фармация“, член на Общото събрание на СУ „Св. Кл. Охридски“, член на Университетската учебна комисия на СУ „Св. Кл. Охридски“, отговорник на направление „Физикохимия и молекулно моделиране“ за специалност „Химия“.

За участие в настоящия конкурс за заемане на АД „професор“, доц. д-р Маджарова представя една публикувана монография на тема, „Дизайн на нови твърди магнитни материали без използването на редкоземни елементи“ (Университетско издателство „Св. Кл. Охридски“, 2022 г.) и 11 оригинални научни труда, които не са били използвани при защитата на дисертацията за ОНС „доктор“ (1999) и в конкурса за АД „доцент“ във ФХФ на СУ (2012). Всички публикации, както и монографията са по темата на настоящия конкурс, Теоретична химия-Изчислителна химия. Публикациите са отпечатани в реферирани списания с импакт фактор и квантил, като от тях 9 (82%) са в списания от категория Q1, 1 в Q2- и 1 в Q4 списание). Към момента на оформяне на документите за конкурса, върху публикациите са забелязани 86 цитата (*Scopus*). Общият брой публикации на кандидатката е 41, общият брой цитати е 331, а индексът на Хирш е 12 (*Scopus*).

Във фокуса на теоретичните изследвания на доц. д-р Маджарова са структурата и свойствата на важни за практиката системи, описани посредством умело разработени теоретични модели и изучени чрез методите на изчислителната химия. Изследванията се отличават с дълбочина и новаторство и се състоят в: (i) успешното прилагане на атомистични молекулно-динамични симулации за изследване на надмолекулната структурна организация на биологични структури и на механизмите на свързване на системи за активна доставка на лекарства, (ii) в използване на квантовохимичните методи за моделиране свойствата на магнитни системи, мембрани за газово разделяне и процеси на

възбуждане, както и (iii) в иновативното прилагане на методите на машинното обучение за изследване на връзката „състав-структура-свойства“ в магнитни структури.

Във връзка с възможността за доставка на лекарства и за приложения в храни, много подробно е изследвана обърнатата хексагонална мезофаза, изградена от глицеролмоноолеат (GMO), трикаприн и вода. Охарактеризирано е липид-липидното подреждане и това на границата вода-липид (чрез статистически анализ на данните, получени от траектории при МД симулации). Получени са статистически значими и контрастни изображения на радиалното разпределение на масовата плътност, които показват хексагонална форма на границата моноолеин/вода. Установено е, че водата взаимодейства с главите и образува трислойно дифузно разпределение на масовата плътност. Формата на всеки слой е намерена близка до хексагонална и предполага взаимодействия на далечни разстояния, а водните молекули на границата вода/липид се характеризират с много интензивна динамика и малко от тях са водородно свързани с моноолеиновите глави.

Изследванията са обогатени с добавянето на трикаприлин. Получената система е изследвана в присъствие и отсъствие на лизозим. Доказано е, че улавянето на лизозим предизвиква локално смущение в липидната структура, но не променя поведението на моделните системи, докато вторичната структура на пептида силно се влияе от вмъкването и трябва да се търси оптимален радиус на липидните тръби за минимизиране на смущението. Предложена е тръба с оптимален размер за пренос на протеина с минимална пертурбация на вторичната му структура.

В друго иновативно изследване, доц. д-р Маджарова изучава в детайли факторите, отговорни за формирането на първични мицели от соли на жлъчни киселини. Коректно и изчерпателно е описана структурата на агрегатите, получени в хода на молекулно-динамичните симулации. Установено е влиянието на броя на хидроксилните групи в стероловия фрагмент върху формирането на агрегатите. Доказано е, че хидрофобните взаимодействия са основната стабилизираща сила на първичните мицели, а формирането на водородни връзки ускорява процеса на агрегиране на таурин- и глицин-модифицираните соли. Важно е да се отбележи, че резултатите са в много добро съответствие с експериментални данни, тъй като симулациите са проведени при условия близки до тези в човешкия стомашно-чревен тракт.

Особено внимание заслужават задълбочените изследвания на доц. д-р Маджарова, посветени на моделирането на компоненти от системата за активен транспорт на лекарства, базирана на фолат или антифолати в комбинация с α -фолатен рецептор (FR α). Чрез детайлно изучаване на структурата на б насочващи лиганда във физиологичен разтвор (фолат, 5-метилтетрахидрофолат, ралтитрексед, пеметрексед, метотрексат и птероил орнитин), е установена значителна популация от *cis*-изомери по amidната връзка и с порядък по-бърза структурна динамика на *trans*-изомерите при всички лиганди. Резултатите са показали, че независимо от структурното разнообразие в течна среда, молекулната площ, налична за взаимодействия с водните молекули, остава почти

постоянна. Определена е преобладаващата тавтомерна форма на фолата в разтвор. Теоретични и експериментални данни са предсказали бърз обмен на протони между N1 и N3 позициите на птерин. Важен принос при тези изследвания е предложеният за първи път в литературата атомистичен модел на неопластична клетъчна мембрана (базирана изцяло на експериментални данни), с който в дълбочина и с много детайли е описано взаимодействието на лигандите с α -фолатен рецептор (FR α). Изследвано е влиянието на начините на скалиране на налягането върху резултатите от симулациите. С този модел е наблюдавано спонтанно свързване на три лиганда към активния център на рецептора (фолат, ралтитрексед и 5-метилтетрахидрофолат).

TDDFT формализмът, който използва “bootstrap kernel” и успешно описва екситонната природа на възбуждане, е приложен за изчисляване на диелектричната функция на три молекулни кристали (пицен, пентацен и 1D-полимера поли(р-фениленвинилен)). Този формализъм е предложен за бърза оценка на спектрите на възбуждане на материали.

Многобройните резултати, получени при моделирането на магнитните свойства на постоянни магнити без редкоземни елементи в структурата, са описани в детайли в две научни статии и в публикуваната монография. Фокусът на изследванията е върху магнитните свойства на Хойслерови сплави и възможните тетрагонална и хексагонална деформации, спонтанната намагнитеност и енергията на магнитокристалинната анизотропия. Моделирано е изграждането на стекове от съществуващи бинарни магнити на FePt, MnAl и MnGa, с цел повишаване на магнитокристалинната анизотропия на образуваната L10 структура. Тези изследвания са особено актуални, тъй като са свързани с търсенето на нови твърди магнити без редкоземни елементи в структурата, особено важни за целите за въглеродно-неутралната икономика.

Монографията, която е написана на 92 страници и цитира 74 литературни източници и интернет-страници, прави изчерпателен преглед на използваните в практиката магнитни материали, представя основните характеристики на перманентните магнити и очертава възможностите за квантовохимично моделиране и теоретично прогнозиране. Идеята за изследване на фазовото пространство на Хойслерови сплави е разширена с акцент върху хексагоналната структура като потенциален кандидат за изготвяне на постоянни магнити с голяма магнитокристалинна анизотропия. Установени са факторите, които влияят на основните магнитни характеристики.

Категоричен принос в тези изследвания е предложеният 14 параметров модел, който дава възможност качествено и полу-количествено да се предскаже общия магнитен момент на елементарната клетка на произволна структура, съставена от d-, p- и част от f-елементите, за която се знае обема. Избрани са параметри тясно свързани с индивидуалните характеристики на атомите като електронно сродство, йонизационен потенциал, електроотрицателност, брой валентни електрони и ковалентен радиус. С тези изследвания, доц. д-р Маджарова убедително показва възможността за приложение на машинното обучение в материалознанието и по-конкретно в областта на магнитните материали.

Авторската справка на доц. д-р Маджарова описва в детайли конкретната мотивация и хода на изследванията, най-важните резултати и изводи от тях, и много ясно очертава собствените приноси на кандидатката. Те се състоят в разработването на оригинални и физически-коректни теоретични модели за провеждането на атомистични МД симулации на надмолекулната структурна организация на биологични структури, за изследване на спонтанната агрегация на соли на жлъчни киселини във воден разтвор, както и за изучаване на механизмите на свързване на системи за активна доставка на лекарства. Принос в изследванията също са и многобройните резултати и теоретични зависимости, получени при квантовохимичното моделиране на магнитните свойства на постоянни магнити без редкоземни елементи в структурата и при изчисляване спектъра на възбуждане на молекулни кристали и 1D полимери. Чрез успешно прилагане на методите на машинното обучение са установени важни за практиката корелации „състав-структура-свойства“.

От анализа на проведените теоретични изследвания се оформя впечатлението, че доц. д-р Маджарова е задълбочен изследовател с иновативни идеи, за решаването на които компетентно прилага широк набор изчислителни методи и алгоритми. Описаните в публикациите изследвания впечатляват с изключителна дълбочина и изчерпателност, както и с многобройните стойностни теоретични резултати. Последните са корелирани с данни от специфични експерименти и това прави заключенията коректни и убедителни.

При прегледа на публикациите и монографията не установих наличие на плагиатство.

Заключение. В конкурса за заемане на АД „професор“, доц. д-р **Галя Костова Маджарова** е представила една публикувана монография и достатъчен брой научни трудове след защитата на ОНС „доктор“ и заемането на АД „доцент“. Последните са отпечатани в авторитетни международни списания с висок импакт фактор и квантил, което е доказателство за тяхното високо качество и международно признание. В изследванията на кандидатката има оригинални научни и методологични приноси, както и много стойностни резултати. Като имам предвид високото научно ниво и обема на проведените изследвания, наукометричните и биографичните данни на кандидатката, убедено гласувам „за“, доц. д-р **Галя Костова Маджарова** да заеме академичната длъжност „професор“ по ПН 4.2. „Химически науки“ (Теоретична химия-Изчислителна химия) във ФХФ на СУ.

Рецензент:

София, 29.06.2022 г.

(Наташа Трендафилова, проф. д-р, ИОНХ-БАН)