

С Т А Н О В И Щ Е

по конкурса за академичната длъжност „Професор“ по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия - Изчислителна химия) към Факултета по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“, обявен в Държавен вестник

бр. 21 от 15.03.2022 г.,

с кандидат доц. д-р Галя Костова Маджарова

от проф. дхн Тодор Минков Дудев

Факултет по химия и фармация на Софийския университет

В конкурса за професор по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия - Изчислителна химия) към Факултета по химия и фармация на Софийския университет участва само един кандидат – доц. д-р Галя Костова Маджарова. За участие в конкурса кандидатът е представил пълен комплект от документи в съответствие с изискванията на Правилника за прилагане на Закона за развитието на академичния състав в Република България и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“.

Биографична справка

Доцент Галя Маджарова е възпитаник на Химическия факултет на СУ „Св. Кл. Охридски“, където през 1995 г. получава образователната степен Магистър по Химия (Специализация: Химична физика и теоретична химия), а през 1997 г. придобива квалификация за Учител по химия и химична технология. През 1999 г., под ръководството на проф. Николай Тютюлков и проф. Аля Таджер, успешно защитава докторска дисертация на тема “Структура на 1D полимери с магнитни свойства“. Професионалната си кариера започва през 2001 г. като асистент по теоретична химия към катедрата по Физикохимия на ХФ на СУ, където последователно израства до старши асистент (2002 г.), главен асистент (2005 г.) и доцент (2013 г.). Специализирала е в реномирани научно-изследователски центрове като Max Planck Institute of Microstructure

Physics, Halle, Германия; University of Hull, Великобритания; Institute for Chemistry of Surfaces and Interfaces, Mulhouse, Франция; Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto, Япония и University of Leipzig, Германия.

Наукометрични данни

За конкурса доц. Маджарова е представила 11 научни публикации и 1 монография, които са издадени след защитата на нейната докторска дисертация и проведения конкурс за доцент. Всички публикации са отпечатани в реномирани реферирани международни списания (напр. J. Chem. Theory and Computation, J. Phys. Chem. B, J. Mol. Liquids, Phys. Chem. Chem. Phys.) с импакт фактор и квантил (от тях 9 с Q1, 1 с Q2 и 1 с Q4). Върху тези работи са забелязани 86 независими цитирания. Шест от представените статии са изработени в сътрудничество с чуждестранни учени. Като цяло, доц. Маджарова е съавтор на 41 публикации, чиито резултати са цитирани над 330 пъти в научната литература. Индексът на Хирш на кандидата е 12. Резултатите от изследванията на доц. Маджарова са били представени в рамките на 69 секционни доклади на национални и международни научни форуми. Кандидатът участва активно в национални/международни научни проекти (32 на брой), като е / бил ръководител на 9 от тях. От предоставената справка се вижда, че доц. Маджарова покрива (и в редица случаи значително надхвърля) минималните национални изисквания за академичната длъжност професор по чл. 26 от ЗРАСРБ за научна област Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, както и препоръчителните критерии на ФХФ. Няма данни за извършено плагиатство в публикационната дейност на кандидата.

Научни приноси

Изследванията на доц. Маджарова са насочени към теоретичното моделиране на структурата, електронните свойства и термодинамичните отношения на химични/биохимични обекти от интерес за електрониката, фармацията и медицината. Могат да бъдат обобщени в следните направления:

1. Атомистични молекулно-динамични симулации на биологично значими структури.

Чрез приложение на state-of-the-art молекулно-динамични изчисления е хвърлена нова светлина върху структурните особености на системата глицеролмоноолеат, трикаприл и вода (с и без добавка и на трикаприлин). Оценена е способността на изследваната система за пренос на биомолекули. Изследван е и механизъмът на спонтанна агрегация на друга липидна

система - жлъчни соли - във воден разтвор, като са определени и физичните закономерности, управляващи процеса. В серия от работи експлицитно е моделирана и изследвана мултикомпонентна биологична система за активен транспорт на лекарства, базирана на фолат/антифолати, към алфа-фолатен рецептор. За пръв път в литературата е конструиран и валидиран детайлно съставен атомистичен модел на клетъчна мембрана, което позволява да се наблюдава спонтанното свързване на фолат, ралтитрексед и 5-метилтетрахидрофолат към активния център на рецептора. Изяснени са факторите, обуславящи експериментално установените разлики в афинитета към рецептора на серията от лиганди.

2. Квантовохимични методи за моделиране и приложение на методите на машинното обучение. Чрез приложение на времезависимата теория на функционала на плътността (TDDFT) е моделиран спектър на възбуждане на молекулни кристали на пицен и пентацен и 1D-полимера поли(p-фениленвенилен). Анализът на получените резултати показва, че използваният формализъм представлява надеждна алтернатива за бърза оценка на спектрите на възбуждане на различни материали. От особен интерес е извършеното моделиране на магнитните свойства на постоянни магнити без редкоземни елементи. Убедително са демонстрирани възможностите на Heusler-сплавите за създаване на високоефективни магнити. В монографията „Дизайн на нови твърди магнитни материали без използването на редкоземни елементи“ систематично са изследвани факторите, влияещи върху магнитните свойства на твърдите магнити. Приложени са методите на машинното обучение в търсене на връзката „състав-структура-свойства“ в тези материали. На базата на алгоритъм за дървовидна структура на решенията (Decision Trees) е предложен модел, съставен от 14 параметъра, който е способен качествено и полу-количествено да предскаже общия магнитен момент на елементарната клетка на произволна структура с използване на информация за фундаменталните свойства на елементите, изграждащи композита. Получените резултати могат да се използват като ръководни принципи при дизайна/синтеза на високоефективни твърди магнити без участие на редкоземни елементи.

Учебно-преподавателска дейност

Доц. Маджарова е утвърден и уважаван преподавател във Факултета по химия и фармация с висока репутация сред студентите и колегите. Разработила е / води лекционни курсове по Строеж на веществото (бакалаври), Теоретична химия (бакалаври), Молекулен дизайн (бакалаври), Молекулно моделиране на функционални материали (бакалаври), Квантова химия и молекулна механика (бакалаври), Приложна изчислителна химия (магистри), и Квантова химия и спектроскопия (бакалаври). Била е научен ръководител на 4 успешно защитили дипломанта и съръководител на един докторант.

Заклучение

Представените от кандидата публикации и монография са по темата на конкурса и представляват оригинални научни разработки със значителен принос в областта на теоретичната изчислителна химия и молекулно моделиране. Предоставените материали ми дават основание убедено да смятам, че доц. Маджарова е водещ учен в своята област с дълбоки познания и преактически умения при използването на state-of-the-art теоретични подходи за изследване на високо научно ниво на сложни химични/биологични системи с приложение в електрониката, фармацията и медицината. Получените от кандидата резултати носят иновативен характер и представляват новости в научното изследване. В своята научно-изследователска дейност кандидатът проявява прецизност, творческо мислене и умение да подбира и решава успешно задачи с висок импакт за фундаменталната и приложна наука.

В резултат на гореизложеното, считам убедено, че със своята многообразна научно-изследователска и преподавателска дейност доц. д-р Галя Костова Маджарова напълно отговаря на всички изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност „Професор“. Предлагам доц. д-р Галя Костова Маджарова да бъде избрана за Професор по професионално направление 4.2 Химически науки (Теоретична химия-Изчислителна химия) във Факултета по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“.

18.07.2022 г.

Подпис:



(проф. дхн Тодор Дудев)