

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Мирослав Ангелов Рангелов,

Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия, Българска Академия на Науките
относно материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност
„доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност
„Теоретична химия“ за нуждите на Факултет по Химия и Фармация, СУ “Св. Климент
Охридски“ обявен в ДВ бр. 21 от 15 март 2022 г.

В конкурса за доцент, обявен в Държавен вестник бр. 21/15.03.2022 г. за нуждите на Факултета по Химия и Фармация, СУ “Св. Климент Охридски“, участва само един кандидат: гл. ас. д-р Искра Зарева Колева. За участие в конкурса кандидатът е представил пълен комплект от документи, които удовлетворяват и надвишават изискванията на Закона за Развитие на Академичния състав в Република България (ЗРАСПБ) и Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Кл. Охридски“ и Факултет по Химия и Фармация. Кандидатът отговаря на критериите за заемане на академичната длъжност “доцент“.

Искра Колева е завършила висше образование през 2013 г. като бакалавър по специалността „Компютърна Химия“ и магистър по „Материалознание“ във Факултета по Химия и Фармация, СУ “Св. Климент Охридски“. През 2017 г., под ръководството на проф. дхн Георги Вайсилов и доц. д-р Християн Александров, тя успешно защитава докторска дисертация във Факултета по Химия и Фармация, СУ “Св. Климент Охридски“, на тема „Квантово-химично моделиране на хетерогенни каталитични системи на основата на цериев диоксид“. През 2017 г. постъпва на работа като главен асистент в катедра „Фармацевтична и приложна органична химия“ на Факултета по Химия и Фармация, СУ “Св. Климент Охридски“, която длъжност заема и към настоящия момент.

Д-р Колева е съавтор на 18 научни публикации в списания с импакт фактор, като в конкурса участва с 14 от тях (11 публикации – Q1 и 3 публикации – Q2). Хабилитационният труд на д-р Колева се основава на четири от статиите (всички Q1), в две от които д-р Колева е първи автор. Индексът на Хирш на д-р Колева е 7, общият брой цитати, без самоцитати, за всичките ѝ публикации е 208, а за статиите, участващи в конкурса е 154.

Д-р Колева е представила своите научни резултати на 22 национални и международни форуми, на които е изнесла 12 устни доклада и 10 постерни съобщения. Участвала е също в организирането на една международна и 9 национални научни конференции в областта на химията. Била е на 5 краткосрочни изследователски визити в Universitat de Barcelona, Испания. Научната активност на д-р Колева личи и от броя участия в национални (7) и международни (3) научно-изследователски проекти, като в конкурса към показател Ж са използвани четири от тях.

Учебно-педагогическата дейност на кандидата включва воденето на практически занятия по магистърските и бакалавърските курсове: *Хибридни (QM/MM) методи, Моделиране на периодични системи и наноструктури, Компютърни методи в спектроскопията, Фармацевтичен анализ I и II част, Инструментални методи в химията II част, Биофармация.* Д-р Колева е била и научен ръководител на една дипломна работа.

Научните приноси на включените в конкурса статии са в областта на теоретичните квантовохимични изследвания. В хабилитационния си труд д-р Колева представя четири работи, в които квантовохимични изчисления са използвани за теоретично изучаване на проблеми, свързани с хетерогенния катализ. В основната си част той е посветен на теоретични моделни изследвания на важни за каталитичните свойства параметри на Zr^+ и Y^+ , дотирани цериево диоксидни повърхности и наночастици, като е изяснено разпределението на допантите в дотираните цериево диоксидни системи, влиянието на различно количество допанти, а също така и тяхното влияние върху редуцируемостта на SeO_2 .

Отделно квантовохимично изследване има за цел да хвърли светлина върху трудните за експериментално наблюдение промени в електронната структура на платинови катализатори при свързването им с CO. Изследвано е влиянието на CO върху различни по размер модели на платинови кълъстери и нанोजици, отложени върху SeO_2 .

Представени са също теоретични термодинамични и кинетични изследвания върху взаимодействието на въглеродни атоми с различни наночастици и кристални повърхности на благородни и неблагородни метали. Установени са термодинамично стабилните позиции на въглеродните атоми, както и бариерите, свързани с тяхното преместване между подповърхностните и повърхностните слоеве на метала.

Някои от изследваните от д-р Колева катализатори са с висок потенциал за внедряване в практиката поради високата им активност и относително по-ниската им цена, спрямо използваните в момента катализатори на базата на благородни метали.

Включените в конкурса по показател Г статии също са в областта на теоретичните квантовохимични изследвания и са концентрирани както върху взаимодействията между

органични молекули и зеолити и мезопорести силикати, така и върху комплексите на различни тривалентни метали с кукурбитурили с различна големина на пръстена. Въпреки че са отдавна известни като клас съединения, текущо научният интерес към тях отново нараства поради възможността им да се използват за транспорт на лекарства, а също и благодарение на свойството им да стабилизират и модифицират багрилата, използвани в багрилни лазери.

Заклучение

Цялостната научна дейност на кандидата е в областта на теоретичната химия, което напълно съвпада с областта и професионалното направление на обявения конкурс. Представените от кандидата публикации са по темата на конкурса, представляват оригинални научни разработки със съществен принос в областта на теоретичните изследвания на хетерогенния катализ и имат иновативен характер. В резултат на гореизложеното, убедено смятам, че със своята научно-изследователска дейност гл. ас. д-р Искра Колева напълно отговаря на всички изисквания на Закона за заемане на академичната длъжност „Доцент“, във връзка с което предлагам тя да бъде избрана за “Доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Теоретична химия“ за нуждите на Факултета по Химия и Фармация, СУ “Св. Климент Охридски“ .

Изготвил становището:

доц. д-р Мирослав Рангелов

07.07.2022