

СТАНОВИЩЕ

от проф. дхн Соня Върбанова Илиева,

Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен

'Доктор'

професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия)

Автор: Стоян Павлов Граматиков

Тема: *Квантовохимично изследване на адсорбция и химични трансформации в зеолити*

Научен ръководител: чл.-кор. проф. дхн Георги Вайсилов

Автор на дисертационния труд е Стоян Павлов Граматиков – редовен докторант в катедра Органична химия и фармакогнозия, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски, зачислен със заповед No РД-20-123/19.01.2023, считано от 01.02.2023, с научен ръководител проф. дхн Георги Вайсилов. Поради готовност на дисертационния труд и след положително решение на катедрата, Стоян Граматиков е отчислен предсрочно с право на защита, считано от 01.12.2025 г. Докторантът е положил с Отличен изпити по специалността, по Английски език и две допълнителни дисциплини по тематика, свързана с работата по дисертационния труд – Компютърно моделиране и Хетерогенен катализ.

С. Граматиков е завършил висше образование в СУ „Св. Кл. Охридски“, Факултет по химия и фармация като Бакалавър по Органична химия (2021) и Магистър по специалност Изчислителна химия (2022), след което (2023) е зачислен като редовен докторант във ФХФ. Научната работа на Стоян в областта на Теоретичната химия в групата на проф. Вайсилов започва още по време на следването в ОКС Бакалавър.

Представените от Стоян Граматиков материали са в съответствие със Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и Правилника за прилагането му и отговарят на критериите за придобиване на научната и образователна степен „доктор“. С Граматиков е съавтор на 7 публикации в авторитетни международни списания с импакт фактор, 20 цитати, h индекс 3 (WoS).

В дисертацията са включени **три научни статии**, публикувани 2025-2026 в *Microporous Mesoporous Mater.* (IF 4.7, квартил Q1), *JACS* (IF 15.7, Q1), *Small Methods* (IF 9.1, Q1). Отбелязани са 4 цитирания. С. Граматиков е представил резултатите

от научните разработки, в които е участвал на 6 национални и международни конференции с постери и доклад. От необходимите 30 точки по показатели Г на минималните национални изисквания, докторантът има **75** точки. Освен това, в справката докторантът е представил допълнително **70** точки по показатели Ж (h индекс 3 и участие в 4 научни проекти). **Следователно минималните критерии за научна степен Доктор са покрити и надвишени.**

Основна задача на дисертационния труд е да се анализира структурата, устойчивостта и електронните свойства на три типа зеолитни материали (германосиликатен зеолит MFI, RHO зеолит, зеолити с органични помощни вещества) и настъпващите изменения в тях в резултат на присъствието на гост-молекули в каналите и кухините на зеолитната кристална решетка. За реализиране на тази задача са приложени методи на квантовата химия, базирани на Теорията на функционала на плътността с отчитане на дисперсионни взаимодействия и *ab initio* молекулна динамика. Получените теоретични резултати са съпоставени и анализирани с релевантни експериментални данни.

Темата на дисертацията е актуална и особено интересна от научна гледна точка като се имат предвид от една страна обектите – зеолити, тяхното значение и приложение в практиката и от друга – използваните теоретични методи и подходи. Освен това работата е свързана с анализ и установяване на структури и свойства въз основа на комбиниране на експериментални и теоретични резултати. Основният принос на докторанта е в провеждането на теоретичните изчисления. Получените теоретичните данни допълват експеримента, но не могат да бъдат получени от него. На тяхна основа надеждно са предсказани структури, предложени са нови хипотези и са коригирани съществуващи такива.

Основни приноси на дисертационния труд

Доказана е структурата на германосиликатен зеолит MFI, получен и изследван експериментално в групата на проф. Минтова (CNRS, Франция). Проведени са DFT изчисления (PBE функционал с дисперсионни корекции, програмен код VASP) за изясняване структурата и потвърждаване наличието на допълнителен кислороден център в решетката на германосиликатния зеолит. Съответствието с експеримента е извършено чрез сравняване между изчислените отмествания във вътрешните електронни нива и данните от рентгенов фотоелектронен спектър. Доказаното съществуване на нов тип структурен фрагмент (двоен кислороден мост) в решетката на зеолита може да се разглежда като фундаментална (концептуална) промяна в разбирането на порестите германосиликатни структури. Изследването не само задълбочава

разбирането за включването на Ge в зеолитните решетки, но и предоставя насоки за дизайн и синтез на нови материали с целенасочено контролирани свойства.

Изследвана е структурната гъвкавост на наноразмерен RHO зеолит при криогенни условия и влиянието върху адсорбционното поведение. Проучен е ефекта на адсорбцията на вода, замръзване и повторно нагряване върху гъвкавостта на кристалната решетка и динамиката на катионите в RHO нанозеолита чрез използване на прахова рентгенова дифракция (XRPD), FTIR спектроскопия и DFT симулации. Измененията в структурата на RHO зеолита са изследвани чрез QM и ab-initio MD изчисления, оценено е влиянието на температурата и количеството абсорбирана вода. Структурата на RHO зеолитите е известна със своите адаптивни свойства, способност за селективно адсорбиране на газове и гъвкавост, позволяваща промяна на размера на порите, което ги прави ценни за приложения при процеси на пречистване, разделяне и съхранение на газове.

За първи път е изчислена енергията на прехода от състояние алфа-кварц чрез приложение на DFT квантовохимични изчисления. Основен принос на изследването е предоставянето на първия изчерпателен набор от данни за енергиите на трансформация за всички зеолитни решетки в базата данни IZA. Въз основа на проведените теоретични пресмятания са обяснени експериментални данни за предпочетено образуване на даден тип зеолитна решетка.

Без съмнение считам, че Стоян Граматиков е усвоил и успешно приложил теоретични изчисления за решаването на поставените задачи. Общата презентация на докторанта демонстрира отлична химическа подготовка, настойчивост, последователност и целенасоченост в работата, както и висока научна образованост.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Въз основа на представените материали и научни публикации, тяхната значимост и съдържателните се в тях научни приноси, убедено давам своята **положителна оценка** и гласувам с „да“ за присъждането на образователната и научна степен **„Доктор“** на **Стоян Павлов Граматиков в професионално направление 4.2. Химически науки (Теоретична химия).**

10.02.2026

Рецензент:

/проф. Соня Илиева/