

СТАНОВИЩЕ

от акад. проф. дхн **Константин Иванов Хаджииванов**

Институт по обща и неорганична химия - Българска академия на науките

за дисертационен труд

за присъждане на образователната и научна степен **“доктор”**

в професионално направление – 4.2 “Химически науки /Теоретична химия“

Автор: маг. Стоян Павлов Граматиков

Тема: Квантовохимично изследване на адсорбция и химични трансформации в зеолити

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

Институция: Софийски университет „Св. Климент Охридски“ - Факултет по химия и фармация

1. Общо представяне на процедурата и докторанта

Стоян Павлов Граматиков е роден през 1998 г. в София. Магистърска степен получава през 2020 г. от Софийския университет „Св. Климент Охридски“ по специалност „Компютърна химия“, със среден успех 6.00, което е впечатляващо постижение. Със заповед на Ректора е зачислен като редовен докторант към катедра „Органична химия и фармакогнозия“, докторска програма „Теоретична химия“, считано от 01.02.2023 г.

За допускане до защита маг. Граматиков е представил всички изискуеми документи: заявление, дисертационен труд, автореферат, диплома за завършено висше образование (магистър), научна автобиография, копия от научните публикации, включени в дисертацията, както и други съпътстващи материали. Представените документи отговарят на изискванията на ЗРАСРБ и правилника за неговото приложение. Всички изпити по индивидуалния учебен план са положени с отличен успех.

2. Актуалност на тематиката и познаване на проблема

Темата на дисертацията е актуална и свързана с изследване на перспективни зеолитни материали, които имат важно значение както от фундаментална, така и от приложна гледна точка. Докторантът демонстрира много добро познаване на проблематиката и на съвременната научна литература в областта. В библиографията са включени ключови публикации, релевантни към разглежданите въпроси.

3. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Дисертационният труд обхваща 124 нестандартни страници и съдържа 114 литературни източника. Текстът е написан грамотно, практически без печатни грешки, а оформлението е на високо ниво, което показва прецизност и внимание към детайлите.

Дисертацията е в областта на теоретичната химия. Тъй като не съм тесен специалист в тази област, ще се въздържа от оценка на детайлите по използваните изчислителни методи и ще се съсредоточа върху значимостта и достоверността на получените резултати от химическа гледна точка.

Основната цел на дисертационния труд е изясняване на структурата на зеолитни материали и влиянието на адсорбираните молекули върху нея и върху свойствата на зеолитите. Като обекти на изследване са избрани три перспективни класа материали: [Ge]ZSM-5 (MFI), RHO и боросиликатни зеолити. Получените теоретични резултати са последователно съпоставяни с налични експериментални данни.

В резултат на проведените изследвания са постигнати оригинални и научно значими резултати. За първи път е установен нов структурен фрагмент в германосиликатен MFI – двоен кислороден мост между два Ge центъра, доказан чрез съчетаване на DFT изчисления и експериментални спектрални данни. Показана е ролята на този фрагмент за компенсиране на заряда на органичния структуро-насочващ агент, без промяна в степента на окисление на германия.

Чрез *ab initio* молекулна динамика е разкрита ключовата роля на динамиката на алкалните катиони и количеството вода за промяната на симетрията, размера на елементарната клетка и елиптичната деформация на пръстените в зеолит RHO. Установена е ясна взаимовръзка между степента на хидратация, температурата и структурните параметри на материала.

Разработен е нов изчислителен подход за оценка на стабилността на зеолити с несилициеви тетраедрични центрове в присъствие на темплейт. За първи път са изчислени енергиите на трансформация от α -кварц за всички регулярни зеолитни структури в базата данни на Международната зеолитна асоциация. Въведен е дескриптор (ASTE), който отчита едновременно термодинамичната стабилност на решетката и специфичните взаимодействия с органичния структуро-насочващ агент. Получените резултати са в добро съгласие с експерименталните данни и имат както фундаментално, така и приложно значение.

4. Автореферат

Авторефератът е представен на български (53 страници) и английски език (52 страници) и адекватно отразява съдържанието, целите, методологията и основните резултати на дисертационния труд.

5. Наукометрични показатели

Съгласно базата данни Scopus mag. Граматиков е съавтор на 7 научни публикации, всички в реномирани списания от първи квантил (Q1). В дисертационния труд са включени три от тях, публикувани през последните две години.

Една от статиите е в съавторство с научния ръководител и е публикувана в *Microporous and Mesoporous Materials* (IF = 4.7). Другите две са публикувани съответно в

Journal of the American Chemical Society (IF = 15.7) и Small Methods (IF = 9.1). Публикуването в тези високорейтингови списания изисква задълбочен и многостранен анализ на научния проблем, което обяснява и разширените авторски колективи. Независимо от скорошната им поява, публикациите вече имат отчетени 4 цитирания в Scopus.

Резултатите от дисертацията са представени на три национални и две международни научни конференции, както и чрез поканен доклад в научноизследователски институт в КНР.

6. Забележки и препоръки

Нямам съществени забележки към дисертацията.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Научните резултати, обобщени в дисертационния труд, представляват значим и оригинален принос в науката и вече започват да се оценяват положително от международната научна общност.

Въз основа на гореизложеното, убедено давам своята положителна **оценка** за дисертационния труд и предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен **доктор** на маг. Стоян Павлов Граматиков в професионално направление *4.2 Химически науки*“ (Теоретична химия).

17.02.2026 г.

Изготвил становището:

акад. проф. дхн К. Хаджииванов