

## СТАНОВИЩЕ

от д-р Момчил Димитров Димитров, доцент, Институт по органична химия с Център по фитохимия, БАН

относно: конкурс за заемане на академична длъжност „професор” в СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация (ФХФ), професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия – органичен катализ”, обявен в Държавен вестник, брой 52 от 02.07.2019 г.

Със заповед РД 38-445/ 24.07.2019 г. на Ректора на СУ „Св. Климент Охридски”, съм определен за член на научното жури на конкурс за заемане на академичната длъжност „професор” в професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия – органичен катализ“, обявен за нуждите на СУ „Св. Климент Охридски”, ФХФ. За участие в обявения конкурс е подал документи **доц. д-р Християн Александров Александров** от СУ „Св. Климент Охридски”, ФХФ, единствен кандидат.

Представеният ми от д-р Александров комплект материали на електронен носител е в съответствие със Закона за развитието на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и включва всички необходими документи. Кандидатът участва в конкурса с 36 научни публикации в реномирани международни списания с импакт фактор (от категория Q1 – 32 публикации, от категория Q2 – 4 публикации, съгласно SJR) и 1 учебно помагало, които са извън докторската му дисертация и са публикувани след заемането на академичната длъжност „доцент“. Към тях до момента са забелязани 234 цитата. Кандидатът е съавтор на общо 61 научни публикации, от които 57 са в списания с импакт фактор (от категория Q1 – 51 публикации, от категория Q2 – 6 публикации, съгласно SJR), като общият брой на забелязаните цитатите по тях е 637. Научните резултати са представени лично от д-р Александров на 55 национални и международни форума, от които 35 устни доклада (11 от тях поканени) и 20 постерни съобщения. От представената справка за изпълнението на минималните национални изисквания към научната дейност на кандидата се вижда, че по всеки от показателите д-р Александров има необходимия брой точки, като по повечето показатели този брой значително ги надхвърля.

Прегледът на представените материали показва, че кандидатът има ясно изразена тематика и неговата научна дейност е в областта на теоретичното моделиране на структурата и свойствата на катализатори, използвани в хетерогенния органичен катализ, както и на реакции протичащи върху/в тях. Авторската справка е изготвена добре, като компетентно и детайлно отразява научните приноси на кандидата. Проведените квантово-химичните изследвания могат да бъдат обединени в следните направления: (1) Квантово-химично моделиране на зеолитни системи съдържащи катиони и техни комплекси с приложения в катализа [научни трудове 26,34,40,42,49,50,54,55]; (2) Квантово-химично моделиране на каталитични системи на базата на  $\text{CeO}_2$  [научни трудове 30,31,33,35,37,38,39,44,45,48,52]; (3) Квантово-химично моделиране на наночастици на преходни метали и каталитични превръщания върху тях [научни трудове 23,25,27,28,29,41,43,53]; (4) Квантово-химично моделиране на взаимодействието на органични молекули със зеолити и графен [научни трудове 24,32,36,46,47,51,56,57,58]. Няма да описвам подробно всички научни приноси на кандидата, които са обобщени добре в приложената справка. Ще наблегна на някои от тях. Представен е един успешен подход за повишаване на стабилността на наноразмерни зеолити от тип MFI, чрез добавяне на източник на волфрам в

реакционната смес по време на синтеза. Квантово-химичните изчисления показват, че  $W^{VI}=O$  са най-стабилните W-съдържащи центрове, инкорпорирани в порите на този тип зеолит. Показано е, че наличието на W предотвратява появата на силанолни групи чрез образуване на гъвкави W–O–Si мостове, които са по-стабилни от Si–O–Si връзките в зеолитите изградени изцяло от  $SiO_2$ . В друго изследване, с помощта на квантово-химични изчисления е доказано, че хетеролитичната дисоциация на  $H_2$  е силно ендотермична върху Al/O или Si/O центрове в зеолитната структура, но е екзотермична върху извънрешетъчни Al-съдържащи частици, което показва, че комбинацията от Брьонстедови киселинни центрове с извън-решетъчни Al-съдържащи частици е съществена за процесите на хидогениране без наличието на катиони на преходни метали в зеолита.

Сравнението на получените резултати от периодичните квантово-химични изчисления с експерименталните резултати върху каталитични системи на базата на  $CeO_2$  [научни трудове 30, 31, 45], показва че взаимодействието на NO с редуциран цериев диоксид води до образуване на азиди ( $N_3^-$ ) и азотен оксид анион ( $NO_2^-$ ), което е съпроводено с окисление на  $Ce^{3+}$ , като тези частици са установени за първи път при адсорбцията на NO върху твърди повърхности. В друго изследване, чрез използването на периодични квантово-химични изчисления, базирани на теорията на функционала на плътността, е изследвана локалната структура и предпочитаните позиции за итриевите катиони и кислородните ваканции в Y-дотиран цериев диоксид. Показано е, че дотирането не променя съществено редуцируемостта на системите от цериев диоксид, но селективно улеснява образуването на кислородни ваканции на повърхността на дотирания цериев диоксид в сравнение с недотирания.

В поредица научни трудове [24,36,46,51,58], посредством квантово-химично моделиране детайлно е изучено на молекулно ниво взаимодействието между лекарство и мезопорест силикатен носител в системи за контролирано доставяне на лекарствени вещества. В научни трудове 47 и 56 е моделирана структурата и плътността на състоянията на графен, и са изследвани комплекси на графен с непланарни органични съединения като трифенилметилов радикал, анион и катион. Получените резултати показват, че геометрията на органичните молекули не се променя съществено, но промените в плътността на електронните състояния на графена правят възможно идентифицирането на образувания комплекс.

В хабилитационния труд на кандидата (63 страници), много подробно са изследвани факторите влияещи на хидрогенирането на алкени върху преходни метали.

### **Заклучение:**

Научните постижения на доцент д-р Александров са несъмнени и напълно отговарят на тематиката на обявения конкурс. Представените научни трудове след хабилитиране, броят на цитатите, участието и ръководството на проекти от кандидата не само отговарят, но и значително надхвърлят минималните национални изисквания за заемане на академичната длъжност „професор” според ЗРАСРБ и Правилника за прилагане на ЗРАСРБ.

Въз основа на всичко горепосочено, убедено предлагам на уважаемите членове на научното жури да присъдят на **доц. д-р Християн Александров Александров** академичната длъжност „професор” в СУ „Св. Климент Охридски”, ФХФ, по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Органична химия – органичен катализ“.

София, 26.10.2019 г.

Член на Научното жури при СУ, ФХФ:

(доц. д-р Момчил Димитров)