

## РЕЦЕНЗИЯ

по **конкурса за професор** в професионално направление 4.2 Химически науки  
(Органична химия – Органичен катализ)  
обявен в Държавен вестник, бр. 52 от 02. 07. 2019 г.

от проф. д-р **Анела Николова Иванова**, СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет  
по химия и фармация, председател на научно жури назначено със заповед № 38-  
445/16.07.2019 г. на Ректора на СУ „Св. Климент Охридски”

По обявения конкурс е постъпила една кандидатура – на доц. д-р Християн Александров Александров. На разположение са всички необходими документи по процедурата, както и информация по редица допълнителни показатели свързани с конкурса.

Кандидатът е получил степен Бакалавър по химия от Химически факултет на СУ „Св. Климент Охридски“ с отличен успех през 2002 г. От 2008 г. е „доктор“ по Органична химия след успешно защитена дисертация на тема „Теоретично изследване структурата на цинк-съдържащи йони в порите на ZSM-5 зеолити и механизма на дехидрогениране на етан върху тях“. Работи от 2009 до 2014 г. като „главен асистент“ в катедра Органична химия на Химически факултет на Софийски университет „Св. Климент Охридски“ (СУ). През последните 5 години и 4 месеца е на длъжност „доцент“ по Органична химия в Катедра Фармацевтична и приложна органична химия на Факултета по химия и фармация (ФХФ) на СУ „Св. Климент Охридски“.

Преподавателският опит на доц. Александров се базира на проведени лекции и упражнения по „Органична химия 1“ в няколко бакалавърски специалности и на лекции по „Моделиране на периодични системи и наноструктури“ в магистърска програма „Изчислителна химия“. Личните впечатления на студентите от магистърската програма от работата на преподавателя са много положителни. Средната аудиторна заетост на кандидата през последните 4 учебни години е 372 часа.

Доц. Александров е съавтор в общо 58 научни публикации, 57 от които в международни списания с импакт фактор, в 2 глави от книги и в 1 учебно помагало. От подадените за участие в конкурса 36 научни публикации (36 от които публикувани в международни реферирани списания) и 1 учебно помагало нито една не е била част от конкурса за заемане на академичната длъжност „доцент“ и за получаване на ОНС „доктор“. Затова в съгласие с чл. 29, ал. 1, т. 3, 4 от ЗРАСРБ те са използвани по-долу за обобщаване на научните приноси на кандидата. В 6 от работите доц. Александров е първи автор. Повечето от статиите са в много реномирани и популярни в областта международни списания: Nature Materials (1 статия), Angewandte Chemie International

Edition (3 статии), Chemical Communications (1 статия), Journal of Physical Chemistry C (7 статии), Physical Chemistry Chemical Physics (5 статии), ACS Catalysis (2 статии), Microporous and Mesoporous Materials (3 статии). Публикациите, подадени за участие в конкурса, са получили до момента отзвук в научната литература с 209 цитата в международни реферирани издания. Общият брой независими цитирания на публикациите на доц. Александров според базата данни Scopus е 593. Кандидатът е бил ръководител на 1 национален изследователски проект и е участвал в 22 национални и 8 международни проекта. Бил е съ-ръководител на 1 успешно защитена докторска дисертация. Резултати от научните му изследвания, свързани с конкурса, е докладвал на 19 конференции в чужбина, 16 международни и 7 национални конференции в България. Участвал е в организацията на 11 научни форума. Доц. Александров е носител на 3 престижни награди – 1 международна (на фондация „Bernd-Artin Wessels“), 1 национална („Питагор“) и 1 университетска (Годишна награда на Ректора на СУ за 2002 г.). За признаването на квалификацията му от научната общност свидетелства това, че е бил поканен за член на 5 научни журита в конкурси за заемане на академичните длъжности "главен асистент" и "доцент" и че е рецензент на научни статии в международни научни списания.

По отношение на изпълнението на минималните национални изисквания за заемане на академичната длъжност "професор" доц. Александров е представил следните постижения:

- група А - защитен дисертационен труд за получаване на ОНС "доктор" - 50 точки при изисквани 50 точки;

- група В - хабилитационен труд, оценяващ влиянието на адсорбиран водород върху различни каталитични материали, базиран на 6 научни публикации в Q1 - 150 точки при изисквани 100 точки;

- група Г - 30 научни публикации, които не са включени в хабилитационния труд, 26 от тях в Q1, 4 - в Q2 - 730 точки при изисквани 200 точки;

- група Д - 209 цитирания на публикациите представени за участие в конкурса - 418 точки при изисквани 100 точки;

- група Е – съ-ръководство на 1 докторант, ръководство на 1 национален проект (с привлечени средства) и участие в 21 национални и 8 международни проекта, участие в подготовката на 1 учебно пособие – 427 точки при изисквани 150 точки.

От горното обобщение е видно, че кандидатът изпълнява или преизпълнява минималните национални изисквания във всички групи показатели. Всички наукометрични данни покриват общите изисквания на ЗРАСРБ и Правилниците за приложението му, както и допълнителните препоръчителни изисквания на ФХФ на СУ.

Като част от документите по конкурса доц. Александров е подал и хабилитационен труд „Изясняване на факторите влияещи на хидрогенирането на алкени върху преходни метали – теоретично изследване“, в който в рамките на 63 страници са обобщени данните получени по тази тематика и публикувани в 6 от работите по конкурса. Хабилитационният труд е написан ясно и стегнато и са открити най-важните постижения. Може много добре да се проследи и надграждащата логика на изчисленията.

Научните изследвания на доц. Александров са съсредоточени главно в три направления: 1) теоретично описание на свойствата на адсорбирани частици върху повърхности на зеолити и наночастици и различни техни приложения в каталитични реакции (27 работи); 2) изчислително характеризирани на структурата на твърдотелни материали (5 работи); 3) моделиране на приложението на зеолити като контейнери за пренос на лекарствени препарати (4 работи). Използвана е изчислителна методология най-вече от областта на Теория на функционала на плътността в специфичното ѝ приложение за пресмятания в твърдо състояние. Получените резултати са ценни от една страна с това, че изясняват структурата на материалите на молекулно ниво и от друга страна с осигуряването на допълнителна информация, която подпомага разбирането на механизмите на редица каталитични реакции.

Изчислителните работи в първото направление (№ 1, 3, 4-13, 15-23, 27, 28, 30-33) са съсредоточени върху установяване на предпочетените позиции за адсорбция на различни частици (W, C, NO, CO) върху повърхности. Моделите са най-често метални клъстери или части от зеолити с различен размер, върху които се адсорбират от една до няколко атомни групи на различни позиции. Показано е кои са най-стабилните W-центрове в MFI зеолит и е посочено влияние на W върху структурата и киселинността на зеолита. Обяснена е селективността на тази система към CO<sub>2</sub> и NO<sub>2</sub>. Определени са стабилни комплекси на Rh<sup>+</sup> и Pd<sup>n+</sup> в зеолити тип фуказит и е предложен начин на повлияване на каталитичната им активност чрез заместване на CO с NO. Подпомогнато е разбирането на механизма на хидрогениране на етен в деалуминирани HY зеолити. Предложен е ред на стабилност на Fe-съдържащи йони в ZSM зеолити, който е потвърден експериментално. Специално внимание е отделено на разбирането на молекулно ниво на каталитичната активност на CeO<sub>2</sub>. Идентифициран е типът на последователно формиращите се N-съдържащи адсорбати върху повърхността му, което допълва информацията за механизма на каталитична конверсия на NO. Проследено е и влиянието на адсорбция на различен брой и вид Pt-йони/частици върху CeO<sub>2</sub> в отсъствие и в присъствие на CO. Достигнато е до извода, че само вибрационните ивици на оксида не са достатъчни за идентифициране на типа на металните йони. Количествено е характеризирано влиянието на концентрацията на CO

и на присъствието на  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{Y}_2\text{O}_3$  върху производителността на каталитични системи на базата на  $\text{CeO}_2$ . Показано е, че носител  $\text{MgO}$  влияе слабо върху адсорбцията на водород от Pt и Pd наночастици и е посочено подобно на това при Pd активиране на Pt от водород. Получени са нови подробности за втората стъпка от реакцията на хидрогениране на етен върху Pd. Изследвана е адсорбцията на C и O върху Ni наночастици и е предложен критичен максимален размер на частиците за минимизиране на въглеродните отлагания. Моделирана е дисоциацията на  $\text{O}_2$  върху Pt наночастици и е демонстриран положителният ефект на гъвкавостта на повърхността и на включването на благородни метали в сърцевината на частицата.

Фокусът във второто научно направление (работи № 25, 26, 34-36) е определяне на най-изгодните структури на самостоятелни или участващи в комплекс твърдотелни материали. Това включва адсорбция на паракват във фауказитов зеолит и на хидропероксиди и алкени в M-X зеолити. Определена е геометрията и е пресметната плътността на състоянията на комплекси на графен с непланарни органични съединения.

Публикациите в третото направление от изследвания на доц. Александров (№ 2, 14, 24, 29) целят да изяснят чрез квантово-химични пресмятания взаимодействието между носителя и лекарствения препарат. Изследвани са лекарствата месалазин, кверцетин, куркумин и верапамил, а носителите са умалени модели на зеолити. Обяснено е защо месалазин не се задържа в зеолита и как кверцетин се свързва към повърхността на чист,  $\text{NH}_2$ - или Zn-модифициран силикалит, а куркумин – към  $\text{NH}_2$ -функционализиран силикалит. Проверено е и влиянието на  $\text{SO}_3\text{H}$  и  $\text{COOH}$  върху свързването на верапамил към силикалит.

Всички научни изследвания са детайлни и са проведени коректно с подходящ квантово-химичен метод подбран след внимателно напасване на изчислителната процедура. В повечето случаи се предлага теоретично обяснение на наблюдавани експериментални явления и изследванията са проведени в сътрудничество с експериментални групи. Проверено е влиянието на различни фактори, които могат да окажат влияние на резултатите, без да се променя сложността на модела. В моделите са включени най-важните компоненти от изследваните системи, които да позволят извеждане на качествени и количествени зависимости. Всичко това откроява високата стойност на получените резултати, които добавят ново знание в съответните научни области.

Представеното учебно помагало е навременно и полезно, тъй като съдържа упътвания за провеждане на лабораторни упражнения и набор от задачи по Органична химия за студентите от спец. Фармация.

Към бъдещата работа на кандидата имам следната препоръка:

- да изгради и утвърди самостоятелна изследователска тематика в областта на конкурса (Органичен катализ), в която да има водеща роля, за което съм напълно убедена, че е отлично подготвен.

Бих искала да отбележа, че доц. Александров е отличен учен и много стойностен колега. Той работи успешно както в рамките на Катедрата по органична химия и фармакогнозия, така и като член на академичния колектив на ФХФ. Развива успешно и поддържа дългогодишни сътрудничества с учени от други изследователски институции в чужбина и България. Всичко това го очертава като перспективен член на общността на хабилитираните преподаватели във ФХФ.

В заключение, представените по конкурса материали покриват всички изисквания на ЗРАСРБ, Правилниците за прилагането му и допълнителните изисквания на Факултета по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“ за академичната длъжност „професор“. Това ме мотивира да дам положителна оценка на кандидатурата на доц. д-р Християн Александров и да гласувам „за“ избирането му за заемане на тази длъжност.

28. 10. 2019 г.

Председател на научното жури:

/проф. д-р А. Иванова/