

## СТАНОВИЩЕ

от д-р **Бистра Атанасова Стамболийска**, доцент в **ИОХЦФ – БАН**

на материалите, представени за участие в конкурс  
за заемане на академичната длъжност „доцент” в **ИОХЦФ – БАН**

по област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика”  
професионално направление „4.2. Химически науки”, научна специалност  
„Биоорганична химия, химия на природните и физиологично активни вещества”

В конкурса за „доцент”, обявен в Държавен вестник, бр. 43 от 31.05.2019 г. и в интернет-страница на ИОХЦФ – БАН, като единствен кандидат участва **д-р Мирослав Рангелов**.

### Общо представяне на процедурата и кандидата

Представеният комплект документи и материали за рецензиране отговарят на изискванията на Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИОХЦФ – БАН. Кандидатът е приложил разширена хабилитационна справка; списък и копия на статии извън дисертационния труд, от които 5 са в категория „Публикации в специализирани научни издания, равностойни на монографичен труд“ и 11 в категория „Други оригинални научноизследователски публикации”; глава от книга и списък с цитати на статиите между 2008 и 2012 г. Разпределението на списанията, в които са публикувани научните трудове, по съответните Q фактори е както следва: 9 - в Q1, 4 - в Q2 и 3 - в Q4. Приложена е и обобщена справка, от която се вижда, че д-р Мирослав Рангелов по всички показатели надвишава националните и допълнителните минимални изисквания на ИОХЦФ – БАН за заемане на длъжността „доцент“.

Мирослав Рангелов е придобил магистърска степен по специалността „Органична и аналитична химия“ в СУ „Св. Климент Охридски“ през 1997 г. и образователната и научна степен „доктор“ през 2008 г след успешна защита на дисертация на тема „Участие на вицинална хидроксилна група в биосинтеза на пептидна връзка в рибозомата“. Професионалното му израстване протича изцяло в ИОХЦФ – БАН. От 2002 до 2005 е химик, през 2005 след спечелен конкурс е назначен за научен сътрудник, а от 2011 г. до сега е главен асистент в лаборатория „Химия и биофизика на протеини и ензими“.

### Обща характеристика на дейността на кандидата

За участие в конкурса са представени 16 научни статии в издания, които са реферирани и индексирани в световните бази данни с научна информация. Показателно за качеството и актуалността на представените изследвания е факта, че 70 % от резултатите (11 статии) са публикувани в списания с висок импакт фактор, като Journal of the American Chemical Society (IF<sup>2018</sup>=14.69), ACS Chemical Biology (IF<sup>2018</sup>=5.374), European Journal of

Medicinal Chemistry (IF<sup>2018</sup>=4.83), Journal of Organic Chemistry (IF<sup>2018</sup>=4.74), Food Chem. Toxicol (IF<sup>2018</sup>=3.97), Metallomics (IF<sup>2018</sup>=3.57), The Journal of Physical Chemistry A (IF<sup>2018</sup>=2.84), Drug Development Research (IF<sup>2018</sup>=2.64), International Journal of Quantum Chemistry (IF<sup>2018</sup>=2.26), Journal of Molecular Graphics and Modelling (IF=1.86). Изследванията са намерили добър отзвук в научната литература. Съгласно актуалната справка в базата данни SCOPUS статиите, участващи в конкурса заедно с двете публикации, включени в дисертационния труд на кандидата, са цитирани 134 пъти (без самоцитиране) в реномирани международни списания. H фактор е 8. Личното участие на д-р Мирослав Рангелов в проведените изследвания е значим и безспорен. В пет от представените статии той е първи и в пет втори автор.

Научните приноси на д-р Мирослав Рангелов са в областта на компютърното моделиране на биологични системи и процеси. Голяма част от изследванията са насочени към изясняване на механизма на аминокиселинния катализ на естери като моделна реакция за образуване на пептидна връзка в рибозомата. В работата на кандидата правят впечатление предложените нови подходи и компютърни програми за решаване на различни проблеми свързани с молекулното моделиране на процесите в биологичните системи. Създаден е софтуерен продукт (MolRan) за автоматично намиране на най-подходящия изчислителен метод на базата на статистически анализ, както и за генериране на най-ниска по енергия структура на преходно състояние с предварително определена топология и определяне на енергетично най-изгодния реакционен път. Оригинален алгоритъм с построяване на графични каталитични карти позволява да се определи оптималната позиция на протон-донорни или протон-акцепторни групи спрямо реакционния център за активиране или инхибиране на синтеза на пептидна връзка. Разработен е и нов изчислителен метод за неутрализиране на некомпенсираните заряди на фосфатните групи в рибозомата с добавяне на противойони.

Задълбочено проведените научни изследвания с подходящи изчислителни методики са направили възможно оценяването на различните факторите, които влияят върху механизма на образуването на пептидна връзка в живите клетки. Тези проучвания са от съществено значение за медицинската химия и лекарствения дизайн. Като особено интересни бих определила по-новите изследвания насочени към моделиране на молекулни структури и комплекси между биологично активни молекули и техните рецептори и прогнозиране на лекарствената им активност спрямо тези рецептори. Обект на изследване са вещества, които имат потенциални приложения като лекарства за лечение на рак, подагра, епилепсия, както и антитела за лабораторна диагностика и медицински изследвания.

### **Участие в проекти и научни форуми**

Съществена част от научно изследователската работа на кандидата е свързана с активно участие в международни и национални проекти. Той е ръководител на два проекта - един международен, финансиран от 7 Рамкова програма и един национален, финансиран от ФНИ и е участник в 5 международни и 16 национални научни проекта, финансирани от Европейски Рамкови програми, ФНИ и ХТМУ.

Резултатите от научните изследвания са представени с 29 постерни и 17 устни доклади на 46 национални и международни конференции, 23 от които са проведени през последните 5 години.

### **Лични впечатления**

Познавам д-р Мирослав Рангелов като учен с интердисциплинарни познания, който с желание се включва в решаване на различни научноизследователски проблеми. Той е овладял и успешно прилага модерните методи и подходи, като молекулно моделиране и хроматографски (HPLC) техники за анализ на синтетични и природни продукти, археологически и художествени материали. Добър специалист е по програмиране и обработката на данни от научни експеримент със статистически и други изчислителни методи.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

В обявения конкурс д-р Мирослав Рангелов представя достатъчен брой научни трудове с високо качество, публикувани след материалите, използвани при защитата на ОНС „доцент”. Големият брой цитирания са еднозначно доказателство за актуалността на проведените изследвания и използването им от научната общественост. Кандидатът е изграден специалист, който с успех може да решава самостоятелно разнообразни научни проблеми в областта на фармацевтичната химия и лекарствения дизайн.

След запознаване с представените в конкурса материали и научни трудове, анализ на тяхната значимост и съдържащи се в тях научни приноси, намирам за основателно да дам своята положителна оценка и да препоръчам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ – БАН за избор на д-р Мирослав Рангелов на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност „Биоорганична химия, химия на природните и физиологично активни вещества”

16.09.2019 г.

Изготвил становището:

/доц. д-р Б. Стамболийска/