

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн Соня Върбанова Илиева,
Факултет по Химия и Фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“
на материалите, представени за участие в конкурс
за заемане на академичната длъжност „доцент“
в професионално направление 4.2. Химически науки (Органична химия)
в ИОХЦФ – БАН, Лаборатория Структурен органичен анализ

В конкурса за ‘доцент’, професионално направление 4.2. Химически науки (Органична химия), обявен в Държавен вестник бр. 40 от 16.05.2025 г. като единствен кандидат участва гл. ас. д-р Симеон Стоянов Стоянов, Лаборатория Структурен органичен анализ, ИОХЦФ.

Общо представяне на получените материали

Представените от гл. ас. д-р Симеон Стоянов материали по конкурса **отговарят на всички изисквания** на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и на съответните Правилници за прилагането му (вкл. тези на ИОХЦФ, БАН). Кандидатът отговаря и надвишава критериите на ИОХЦФ за заемане на академичната длъжност “доцент”.

Гл. ас. С. Стоянов има публикувани общо 32 научни статии (122 цитати, h индекс 6), като за участие в настоящия конкурс е представил **26 публикации в научни списания**, които не повтарят представените за придобиване на научна степен доктор. Представените публикации се разпределят по съответните квартали както следва: 6 – Q1; 8 – Q2; 3 – Q3; 7 – Q4; 2 – в нереферирани печатни издания. В конкурса д-р Стоянов се представя със следните параметри:

Показател А – **50 т.** от докторска степен;

Показател В – **166 т.** от представени 9 публикации: 3 публикации в квартал Q1; 2 – Q2; 1 – Q3; 3 – Q4 (изискуем минимум 100 т.);

Показател Г – **273 т.** от представени 15 публикации: 3 публикации в квартал Q1; 6 – Q2; 2 – Q3; 4 – Q4 (изискуем минимум 220 т.)

Показател Д (цитати) – **238 т.** (изискуем минимум 70 т.)

Представена е **разширена хабилитационна справка за научните приноси** на кандидата на български и английски език. В справката са дискутирани в стегнат и ясен вид основните научни разработки, в които е участвал д-р Стоянов, представени в **14** от публикациите, с които кандидатът участва в конкурса. Представени са приложения на вибрационната ИЧ спектроскопия и квантово-химични изчисления за изучаване структурата и стабилността на анионни производни, съдържащи циано-, карбонил- и нитрогрупи. Работата по тази тематика представлява продължение и развитие на изследванията, включени в докторската дисертация на С. Стоянов. В края на справката са изложени кратко перспективи за бъдещата работа на кандидата.

Кратки биографични данни

С. Стоянов е завършил висше образование като Магистър по органична и аналитична химия в Химически факултет на СУ „Св. Кл. Охридски“, 2001 г. През 2004 г. постъпва като химик в ИОХЦФ – БАН, а 2005 г. е зачислен като редовен докторант в Лабораторията по Структурен органичен анализ на ИОХЦФ. През 2009 г. защитава докторска дисертация на тема *„ИЧ-спектрални и структурни промени, породени от превръщането на нитрили в аниони и радикали“*, след което продължава научната си работа в Лаборатория СОА като асистент и в последствие гл. асистент (2011 - до сега). Научно-изследователската му работа е с фундаментален и научно-приложен характер в областта на органичната химия, молекулната спектроскопия и квантовата химия и е посветена на синтез, пречистване и охарактеризиране на органични съединения и анионни производни чрез ИЧ спектроскопия и квантово-химични изчисления. Следователно натрупаният професионален и научен опит на д-р Стоянов е изцяло свързан с обявения конкурс.

От документите по конкурса се вижда, че С. Стоянов е провел четири краткосрочни специализации – обучения по спектроскопия и теоретична химия, свързани с научната му работа. Участвал е в редица национални и международни научни форуми с 2 доклада и над 30 постера и в 14 национални научни проекта.

Обща характеристика на дейността на кандидата

Цялостната научна дейност на кандидата е в областта на органичната химия, което напълно съвпада с областта и професионалното направление на обявения конкурс. Научните публикации, представени за участие в конкурса, отразяват работата на С. Стоянов в следните **научни направления**: (i) синтез на анионни производни на органични съединения, симулиране и интерпретация на техните вибрационни спектри; (ii) изучаване и охарактеризиране на антиоксиданти; (iii) анализ на културни ценности чрез комбинирано приложение на спектрални техники.

Получаването и охарактеризирането на карба-, аза-, и оксианиони не е тривиална задача поради редица фактори. За изследването им е разработена методология, базирана на съчетаното използване на експериментални ИЧ спектри и квантово-химични изчисления, с помощта на която са интерпретирани структурите на редица аниони, данни за които в литературата отсъстват или са оскъдни. В лаборатория СОА е разработена специална електролизна кювета за електрохимично генериране на радикаланиони в среда от ДМСО или ДМСО-d₆ и тетрабутиламониева сол. Тя е конструирана така, че да се отделят катодните от анодните продукти, което позволява да се наблюдава само спектъра около катода.

Интерпретацията и отнасянето на вибрационни спектри на анионни производни се затруднява от редица фактори: основните характеристични интервали на анионите и радикаланионите се разширяват и отместват значително спрямо тези на неутралните молекули, в резултат на което се наблюдава значително припокриване на ивици. От друга страна ивиците на ароматните скелетни трептения конкурират или превъзхождат по интензивност тези на функционалните групи. Поради тези и други затрудняващи анализа фактори, в лабораторията е

развит комбиниран експериментално-теоретичен подход при интерпретация на вибрационните спектри на анионни производни, който се основава освен на експерименталните спектри, и на квантово-химични изчисления и нормален координатен анализ чрез теорията на функционала на плътността (DFT) при отчитане ефекта на разтворителя и йонната агрегация. Теоретичните изследванията включват конформационен и структурен анализ на изследваните молекули и в някои случаи изясняване на механизъм на биологично действие. Използваният функционал и базисен набор при квантово-химичните изчисления е валидиран чрез сравнителен анализ на резултати от *ab initio* изчисления и при вариране на базисния набор от гледна точка на точност и изчислително време. За постигане на добро съответствие между експериментални и теоретично изчислени вибрационни честоти в лабораторията е разработен специфичен подход за скалиране чрез регресионен анализ и извеждане на скалиращо уравнение, по което се скалират теоретичните честоти на аниона/радикаланиона. В тези разработки С. Стоянов има основен принос, което се потвърждава и от факта, че е публикувана самостоятелна статия (4В от справката) в утвърдено и реномирано международно списание (*J. Phys. Chem. A*).

В резултат на съвместната работа с колеги от лаборатория СОА, ИОХЦФ, ХТМУ, ФХФ на СУ и др. са публикувани резултатите от проведените научни изследвания:

- Спектрални и структурни промени, породени от превръщането на заместени бензофенони в кетилони радикали.
- Вибрационни спектри и структура на карбанионни производни:
 - карбаниони на 1,1,3,3-тетрацианопропан: влияние на близко разположените карбанионни центрове върху честотата на нитрилната група;
 - получаването и изомеризация на карбанионните адукти на 2-{5,5-диметил-3-[(2-фенил)винил]циклохекс-2-енилиден}малононитрил;
 - ИЧ-спектри и структура на карбаниона на фениндион (антикоагулант с фармацевтично значение). Установено е, че превръщането на молекулата в карбанион е съпроводено с коренна промяна във формата на съединението като тетрагоналната конфигурация на централния въглерод се трансформира в тригонална, което води до планарната структура на карбаниона.
- Вибрационни спектри и структура на окси- и азанионни производни: оксианион на апоцинин (с приложение в народната медицина). С цел изясняване механизма на антиоксидантно действие е оценена възможността за улавяне на активни радикали; оксианион и дианион на ацедобен (съдържа се във противовирусни лекарствени продукти); азанион и дианион на салофен (антиревматично, антипиретично, аналгетично и антисептично действие).
- Вибрационни спектри и структура на анионни и радикаланионни, производни на нитроароматни съединения (нитросъдържащи радикаланиони водят до получаване на супероксид, реактивни кислородни видове и в крайна сметка оксидативен стрес). Предмет на изследване са аниони и радикаланиони на бензимидазолони производни, бензимидазолтиони, нимезулид, флутамид.

Смятам, че д-р Стоянов има активно участие в идейното и практическо разработване на представените в хабилитационната справка научни трудове. Показателен е факта, че той е водещ (corresponding) автор в 6 от дискутираните в хабилитационната справка 14 научни публикации.

Част от публикациите, които не са включени в хабилитационната справка на кандидата, са свързани с изучаване и охарактеризиране на антиоксидантни и радикал-улавящи вещества. Смятам, че приносът на С. Стоянов в тези изследвания е свързан с квантово-химични изчисления и ИЧ спектрални изследвания. Другата област, която се откроява в публикациите, които не са включени в хабилитационната справка, е аналитично проучване за изясняване на технологичните характеристики на стенописите в църквата „Успение на св. Иван Рилски“ в Рилския манастир за идентифициране на използваните живописни материали и техники. Тези изследвания имат подчертано приложен характер и имат важно значение за опазване и реставрация на застрашени художествени произведения.

Научните изследвания, в които е участвал д-р Стоянов имат **интердисциплинарен характер**, което се потвърждава от гореизложеното и същността на публикуваните научни разработки. Проведените изследвания и публикуваните резултати имат подчертано **научни и научно-приложни приноси**, които могат да се формулират като доказване с нови средства на съществени нови страни на вече съществуващи научни области, проблеми, теории, хипотези; създаване на нови методологии за анализ; получаване на нови факти.

С. Стоянов е бил съ ръководител на една дипломна работа за ОКС Магистър, 2018 г. Участвал е като асистент при провеждане на Международна лятна школа по ИЧ спектроскопия и рентгенова дифракция в ИОХЦФ, 2013 г. Разбира се трябва да се има предвид, че съгласно ЗРАСРБ наличието на учебно-педагогическа дейност не е включено в минималните изисквания за заемане на длъжност доцент.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Въз основа на представените за конкурса материали и научни трудове, гореизложенения анализ на тяхната значимост и съдържащите се в тях научни приноси, убедено давам своята **положителна оценка** и препоръчвам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ-БАН за избор на **гл. ас. д-р Симеон Стоянов Стоянов** на академичната длъжност **‘доцент’** в ИОХЦФ-БАН по професионално направление 4.2. Химически науки (Органична химия).

19.09.2025 г.

Рецензент:

/проф. Соня Илиева/