

СТАНОВИЩЕ

от доцент д-р Мирослав Ангелов Рангелов

Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия – БАН

Член на научно жури в конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2 Химически науки, научна специалност: „Органична химия“ за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ“

1. Общо представяне на получените материали по процедурата

Със заповед № РД-09-127/23.06.2025 год. на Директора на ИОХЦФ – БАН съм утвърден за член на научното жури във връзка с процедура по обявен конкурс за академичната длъжност „доцент“ за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ“, обявен в Държавен вестник, брой 40 от 16.05.2025 г. В конкурса като единствен кандидат участва гл. ас. д-р *Симеон Стоянов Стоянов*. Представеният от кандидата комплект материали е в съответствие със Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за неговото приложение и Правилника за развитие на академичния състав на ИОХЦФ - БАН, и отговаря на критериите на ИОХЦФ - БАН за заемане на академичната длъжност „доцент“. За участието си в конкурса за „доцент“ д-р *Симеон Стоянов* е приложил 24 научни труда извън дисертацията си за „доктор“, които са по проблематиката на конкурса и се приемат за рецензиране:

- Публикации равностойни на хабилитационен труд (Показател В) – 9 броя, разпределени по съответните Q фактори, както следва: Q1 - 3 бр., Q2 - 2 бр., Q3 - 1 бр., Q4 - 3 бр.
- Публикации, извън равностойните на хабилитационен труд (Показател Г) – 15 броя, разпределени по съответните Q фактори, както следва: Q1 – 3 бр., Q2 - 6 бр., Q3 - 2 бр., Q4 - 4 бр.

По показател Д са представени 119 цитирания на научните трудове на кандидата.

По показател Ж, проверка в базата данни на Scopus показва, че д-р *Стойанов* притежава h фактор 6, с което покрива изискванията на ИОХЦФ за академичната длъжност „доцент“.

Резултатите от изследванията са представени на 32 национални и международни научни форуми като постерни съобщения и доклади. Д-р *Стойанов* е представил участия в 14 научноизследователски проекта.

Представените статии, отговарят на изискванията, поставени от ИОХЦФ–БАН за заемане на длъжността „доцент“. Точките по групи показатели за заемане на академичната длъжност „доцент“ са следните: по показател В точките са 166, по група показатели Г точките са 273, по група показатели Д точките са 238. Точките по всички показатели надхвърлят изискуемите минимума.

2. Обща характеристика на дейността на кандидата

Научните интереси на кандидата са насочени основно към изучаването на органични анионни производни – карба-, аза-, оксианиони чрез комбиниран експериментално-теоретичен подход за интерпретация на вибрационните им спектри.

Приносите от изследователската дейност на д-р *Стойанов* са обобщени в пет основни направления - (1) Предсказване на нитрилни честоти и интензивности, наблюдавани при молекули, аниони и радикали на базата на *ab initio* и DFT, (2) Приложение на DFT и солватационните модели за предсказване на спектралните и структурните промени, породени от превръщането на заместени бензофенони в кетилони радикали, (3) Вибрационни спектри и

структура на карбанионни производни, (4) Вибрационни спектри и структура на окси- и азанионни производни, (5) Вибрационни спектри и структура на анионни и радикаланионни производни на нитроароматни съединения.

1. При първото научно направление са установени скалиращи фактори и уравнения за подобряване на точността на теоретичните предсказания за ИЧ честотите и интензивностите на нитрилни групи в молекули, аниони и радикал аниони. След като е открито систематично подценяване на честотите на нитрилите, в изследването са изчислени скалиращи фактори за 11 базисни набора, използвайки B3LYP. За молекули със затворена обвивка и аниони най-добрите резултати са постигнати с базисни набори, съдържащи дифузни функции. За радикал аниони оптималният баланс между точност и изчислителна ефективност е на нивото B3LYP/6-311+G, като е отбелязано, че "трипъл зета" базисни набори са обикновено предпочитани за радикали. Тъй като предсказването на интензивности на нитрилите е по-трудно отколкото предсказването на честоти, се споменава, че *ab initio* методите превъзхождат DFT, а разширяването на базисния набор не подобрява резултатите. Основното заключение е, че използването на базисни набори с дифузни функции е от съществено значение за точното симулиране на тези IR спектри.

2. Във второто научно направление се разглеждат предизвикателствата при точното предсказване на намаляването на честотите на карбонилните групи при превръщането на заместени бензофенони в радикал аниони, при използването на DFT. След тестове с различни функционали, смесеният модел ONIOM-IEFPCM за солватация е идентифициран като много ефективен компромис между точност и изчислителни разходи. Този подход драматично подобрява резултатите, намалявайки MAD между теоретичните и експерименталните честоти на карбонила от 31 cm^{-1} на отличните $4\text{--}6\text{ cm}^{-1}$. Моделът е оценен като успешен, тъй като адекватно описва молекулната структура, конюгацията и поляризируемостта на функционалните групи и е използван за анализ на структурни промени в дължините на връзките, ъглите и разпределението на електронната плътност при образуването на радикал аниони.

3. Третото научно направление изследва връзката между структурата на различни карбаниони и техните вибрационни IR спектри. Изследванията показват, че увеличаването на броя на съседни карбанионни центрове в молекулата, както е в случая на тетрацианопропан, води до значително и кумулиращо намаляване на честотите на разтягане на нитрилите поради индуктивни и мезомерни ефекти. Освен това, изомеризацията на карбаниони адукти показва, че увеличаването на делокализацията на заряда води до леко увеличение на честотите на нитрилите. За фармацевтичното съединение фениндион, депротонирането до неговия карбанион води до големи структурни промени и значително намаление на честотите на карбонилите, като зарядът е силно делокализиран и стабилизирен в молекулната структура. Във всички случаи е открито отлично съвпадение между експерименталните ИЧ данни и теоретичните изчисления, което валидира компютърните модели за предсказване на структурни промени и разпределение на заряда при формирането на карбаниони.

4. В четвъртото научно направление се използват експериментална IR спектроскопия и DFT изчисления за характеризиране на структурата и вибрационните спектри на биологично значими оксианиони и азаниони. При антиоксиданта апоцинин чрез теоретични изчисления са определени предпочитаните му механизми за улавяне на радикали и ИЧ спектърът на неговия ключов интермедиат - оксианион е експериментално валидиран. Също така, анионите на фармацевтичните съединения ацедобен и салофен са синтезирани и техните IR спектри показват систематични отмествания на характеристичните ивици при депротониране; тези промени са точно предсказани от теоретичните изследвания. Структурните анализи разкриват значителни промени в дължините на връзките, ъглите и разпределението на заряда при образуването на анионите и предоставят данни за електронната структура и стабилността на тези фармацевтично важни съединения.

5. В петото научно направление се изследват вибрационните спектри и структурата на анионни и радикал анионни производни на нитроароматни съединения, които са от съществено значение за разбирането на биологичната активност и токсичността на много фармацевтични продукти. Експериментална IR и Раманова спектроскопия, съчетана с DFT изчисления, разкрива, че образуването на радикал аниони води до намаление на честотите на нитрогрупите и значително увеличение на $\nu(\text{C-NO}_2)$. За всички изследвани съединения (включително различни нитробензимидазоли, нимезулид и флутамид) е намерено, че спиновата плътност на радикал аниона е преобладаващо локализирана върху нитрогрупата ($>70\%$), а най-значимите структурни промени настъпват в нитрогрупата и съседния хетероцикъл. Теоретичните данни отлично съвпадат с експерименталните спектри и предоставят важни електронни параметри (редукционни потенциали, HOMO-SOMO енергии, електронни афинитети) за количествено определяне и сравняване на склонността на тези съединения към нитроредукция. Тези изследвания установяват силна връзка структура-спектр-активност, показвайки, че цитотоксичността на тези лекарства при хипоксични условия е директно свързана с образуването на тези радикал аниони.

3. Критични забележки и препоръки

Нямам критични забележки и препоръки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Документите и материалите, представени от гл. ас. д-р Симеон Стоянов Стоянов отговарят на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, Правилника на БАН и Правилника на ИОХЦФ-БАН.

Въз основа на представените в конкурса материали и отразените в тях научни и научно-приложни приноси, давам своята положителна оценка и препоръчвам на останалите членове на Научното жури да бъде изготвен доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ за присъждането на академичната длъжност „доцент“ на главен асистент д-р Симеон Стоянов Стоянов по професионално направление 4.2. „Химически науки“, научна специалност „Органична химия“ за нуждите на лаборатория „Структурен органичен анализ“.

24.09.2025 г.

Изготвил становището:

Доц. Д-р Мирослав Рангелов