

РЕЦЕНЗИЯ

По конкурс за присъждане на академичната длъжност „Професор“ по професионално направление „Химически науки“ - 4.2, научна специалност „Органична химия“ за нуждите на лаб. „Център по ЯМР спектроскопия“, Институт по Органична химия с Център по Фитохимия, БАН, обявен в ДВ бр. 79 от 07.10.2016 г.

Кандидат: доц. д-р Николай Георгиев Василев, Институт по Органична химия с Център по Фитохимия (ИОХ-ЦФ), БАН

Рецензент: Д-р Галя Иванова Иванова, Факултет за науките, Университет на Порто, Порто, Португалия; Е-поща: galya.ivanova@fc.up.pt

Единствен кандидат по обявения конкурс е доц. д-р Никоалй Василев от ИОХ-ЦФ при БАН. Д-р Василев е родена на 8 август 1963 г. в гр. София. Завършва 35 Руска езикова гимназия в София през 1981 г. Висшето си образование получава в СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по Химия и фармация (ФХФ) и през 1988 г. се дипломира като магистър по химия със специализация по химична физика и теоретична химия и постъпва на работа като специалист-химик в лаборатория ЯМР спектроскопия на ИОХ-ЦФ при БАН. През 1993 г. успешно защитава докторска (кандидат на науките) дисертация в СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ под ръководството на доц. Д-р Йорданка Петрова (ФХФ-СУ) и ст.н.с. I ст. дхн Валентин Димитров от ИОХ-ЦФ, БАН. Темата на защитената дисертация е „Синтез, структура, олефиниране и динамични ЯМР изследвания на β -хидроксифосфонати“. След получаване на научната степен кандидат на науките е назначен на работа в лаборатория ЯМР спектроскопия на ИОХ-ЦФ при БАН, където след успешно издържани конкурси е повишен в длъжност н.с. II ст. през 1995 г. и н.с. I ст. през 1997 г. През 2003 г. д-р Василев се хабилитира като доцент по специалността „Органична химия“ при ИОХ-ЦФ, БАН длъжност, която заема и в момента.

За обявения конкурс д-р Василев е предоставил всички необходими документи и информация за своята научна дейност. Д-р Василев участва в конкурса със списък от 96 научни труда публикувани в международни и национални научни списания. В научната литература са забелязани общо над 300 цитата по спомените публикации и кандидата има H фактор 10 (h-index=10). 55 от научните трудове на кандидата са публикувани след придобиване на академичната длъжност „доцент“, като кандидата е автор за кореспонденция в 11 от тях. Те са публикувани в специализирани научни списания със сумарен импакт фактор 72 (Публ. 42-96). Д-р Василев удовлетворява напълно

изискванията и критериите на ЗРАС и ИОХ-ЦФ при БАН за участие в конкурса за присъждане на академичната длъжност „Професор“.

Научно изследователската работа на д-р Василев е свързана с разиване на методологията и приложението на ЯМР спектроскопия за изучаване на молекулната структура и динамика, молекулни взаимодействия и реакционни механизми на материали от областта на химията и биохимията. Основният акцент в неговата научна работа е използването на динамична ЯМР спектроскопия, разработването на софтуер свързан с обработка и/или придобиване на ЯМР данни и приложението на изчислителни методи за решаването на проблеми свързани със структурата и реакционната способност широк диапазон от материали от областта на химията, като например органична и органометална химия, фармацевтична и хранителна химия, и агрохимия.

Съгласно предоставената документация по текущия конкурс, научната работа и приноси на д-р Василев са обособени в четири тематични направления, определящи неговото научно развитие досега:

1. Развитие на методологията на ЯМР спектроскопията.
2. Комбинирано използване на методите на динамичната ЯМР спектроскопия и изчислителната химия.
3. Приложение на ЯМР спектроскопията за изследване на не-равновесни процеси.
4. Приложение на ЯМР спектроскопията в областта на дизайна на нови материали и лекарствени препарати.

Научните резултати и приноси по тези тематични направления са отразени в научните трудове на кандидата - 96 научни публикации. Част от научните публикации са включени в дисертационния труд и конкурса за хабилитация на кандидата, поради което няма да бъдат дискутирани тук. След хабилитирането си, д-р Василев продължава своята научно изследователска работа по споменатите тематични направления, като научните му интереси са фокусирани главно върху методологични и приложни аспекти на съвременни ЯМР методи за изследване на структура и стереохимия на фосфор-съдържащи съединения и органометални комплекси, и комбинираното приложение на ЯМР и изчислителни методи за изследване на механизма и кинетиката на химични процеси.

Научно изследователската работа на кандидата по първото тематично направление е свързана с разработването на нови подходи за оптимизиране на ЯМР експерименти и анализ на ЯМР спектрални данни. Резултати от тази работа допринасят за развитието на

ЯМР метода и неговото приложение за изучаване на молекулната структурата и динамиката, и реакционни процеси в химията и биохимията. В този смисъл основополагаща е работата за оценка на оптималното време на смесване в двумерни ЯМР експериментите за регистрация на обменни процеси (2D EXSY). Разработеният метод е приложен за изследване на „push-pull“ система с обмен между четири състояния. Интерес представлява и разработения метод за измерване на скоростните константи на база на едномерни ЯМР спектри за регистрация на обменни процеси (1D EXSY) с използването на профилни импулси, който води до значително намаляване на продължителността на ЯМР експеримента. Публикации свързани с тези методи са включени в дисертационния труд и конкурса за хабилитация на кандидата.

След придобиване на академичната длъжност „доцент“ д-р Василев продължава своята научна работа по това направление и разработва метод за автоматизиран анализ и определяне на химичните отмествания на резонансни сигнали в ЯМР спектри от първи порядък и разпознаването на припокриващи се мултиплети. Методът е реализиран в компютърната програма „Напълно Автоматичен Анализ на Мултиплети от Първи Порядък (FAFOMA)“, която е публикувана в научната литература и кандидатът е единствен автор. Кандидатът разработва и нов метод за подобряване на отношението сигнал/ шум чрез автоматична корекция на шумовите отскоци във времевата област на ЯМР спектър, тоест корекция на шума в Свободно Затихващата Индукция (СЗИ, FID). Прилагането на разработената процедура позволява да се намали неколкостранно шума в трансформирания ЯМР спектри без да се повлияе формата или полуширината на сигналите в честотната област.

Важно място в научните изследвания и приноси на д-р Василев заемат резултатите от комбинираното използване на методите на динамичната ЯМР спектроскопия с тези на изчислителната химия за изследване стереохимията, конформационни равновесия, бариери на въртене около С-С, С-N и С-метал връзки, обменни процеси и термодинамична стабилност на структури на органични и органометални съединения. При използване на този подход е доказано, че несвързващите взаимодействия в основно състояние са отговорни за разликата в бариерите на ротация около С-N в амиди. На базата на резултати от анализ на формата на линията на ^1H ЯМР спектри, данни от двумерни ЯМР експериментите за регистрация на обменни процеси (2D EXSY) и *ab initio* изчисления е определена статичната и динамична стереохимия на пропелера димезитил-2,4,6-триметоксифенилметан в разтвор, енергетичния бариер и механизма на наблюдавания обменен процес.

При комбинирано използване на динамична ЯМР спектроскопия и изчислителни методи е определена структурата, стереохимията и термодинамичната стабилност на атропизомери на серия орто-заместени 2,2'-диарил-1,1'-бинафталени. Извършените от кандидата експериментални и теоритични изследвания позволяват намирането на енергетичните бариери на атропоизомеризация в изследваните съединения и населеността на атропизомерите, както и механизма на наблюдаваните обменни процеси. Установено е, че енергитичния бариер на атропоизомеризация зависи от размера на заместителя в орто-положение на заместени 2,2'-диарил-1,1'-бинафталени. Изследванията са проведени в сътрудничество с учени от Факултета за природни науки при Университет на Братислава, Словакия.

Особен интерес представляват резултатите от ЯМР изследване на молекулната структура и динамика на нови хирални фосфин-бензенкарбоксамидни лиганди и техни комплекси с паладий. Проведените от кандидата изследвания позволяват идентифициране на отделните конформери и определяне на енергетичният бариер на ротация около amidната връзка при конформационен преход в изследваните структури. Формирането на комплексите на фосфин-бензенкарбоксамидни лиганди с паладий е изучено с помощта ^{31}P ЯМР спектроскопия и е установено, че равновесието между P,O-хелатирани и P,P-нехелатирани комплекси силно зависи от съотношението между лиганд и паладий.

Значителен научен принос имат резултатите от проведени от кандидата изследвания на структурата и конформацията на комплекси на паладий и платина с N-хетероциклични карбени с потенциална каталитична активност, както и техни комплекси с алилови лиганди. Изследванията са базирани на динамична ЯМР спектроскопия и теоритични DFT изчисления. Идентифицирани са конформерите в основно състояние, както и в преходните състояния при ротация около C-N и Pd-C връзката. Проведените изследвания водят до изясняване на връзката между структурата и каталитичната активност на изследваните системи и допринасят за дизайна на структури с желани каталитични свойства.

Третото тематично направление в научната работа на кандидата е свързано с приложението на ЯМР за изследване на не-равновестни процеси. Проведени са изследвания на киселинно катализирана хидролиза на иминохидантоини и бета-фенилтиоуреидо амиди, като са установени продуктите, механизма и кинетиката на реакциите с ^1H ЯМР спектроскопия. Посредством ^{31}P ЯМР е изследван механизма на фосфорилиране на 3-ацил кумарини, като е доказано образуването на междинен продукт и установен скоростоопределящия стадий на реакцията.

Значителна част от научната работа и публикации на д-р Василев са свързани с приложението на едномерни и двумерни ЯМР техники за структурни изследвания на синтетични и природни продукти от областта на химията и биохимията, включително нови материали и съединения с потенциална биологическа активност. Установена е структурата и стереохимията на пептиди, пептидни производни на галантамин, модифицирани аминокиселини и бета-лактами, моделни субстрати за рибозомална имитираща реакция, биологично активни кумаринови и бензимидазолови производни, и платинови комплекси с потенциално приложение в медицината. Установена е структурата на органични лиганди и техни комплекси с преходни метали, които биха могли да намерят приложение, като ефективни системи за очистване на води от тежки метали. Разработен е подход за анализ на липидния състав и определяне на масно-киселинния профил на храни чрез ЯМР спектроскопия. Разработеният от кандидата подход базиран на ¹H ЯМР спектроскопия може да се използва за просто, бързо и точно количествено определяне на наситени, моно- и полиненаситени мастни киселини в хранителни продукти без предварителна обработка на пробата или нейна трансформация.

Както се вижда от представената документация във връзка с конкурса, научните трудове на кандидата са по темата на конкурса и представляват научни разработки със значителен принос в областта на фундаменталната и приложна ЯМР спектроскопия. Приложените материали и моите лични впечатления от кандидата ми дават основание да смятам, че д-р Василев е изграден учен с широки познания, практически умения и компетентност в областта на ЯМР спектроскопия, структурната и изчислителна химия. През своята научна кариера д-р Василев е публикувал 96 научни труда в специализирани списания с общ импакт фактор 123, той е първи или кореспондиращ автор в 11 от тях и има H фактор 10. Забелязани са общо над 300 цитата по публикуваните трудове. Д-р Василев има 4 самостоятелни научни публикации, които са публикувани след получаване на степента кандидат на науките, което показва капацитета на кандидата за самостоятелна научна работа. Останалите научни трудове са колективни, но научните приноси на д-р Василев са очевидни. Прави впечатление, че повече от половината от научните трудове на кандидата са публикувани в национални научни издания със сравнително нисък (или без) импакт фактор, въпреки оригиналността или значимостта на резултатите. Вероятно това е главната причина за ограничения брой на цитати по тези работи.

Публикациите (55 труда) на кандидата след придобиване на академичната длъжност „доцент“ са в научни списания със сумарен импакт фактор 72 и до момента са забелязани около 120 цитата. Резултати от научната работа на д-р Василев са представени на

международни и национални научни форуми като са изнесени общо 13 устни доклада и представени около 70 постера.


Освен изследователската работа, научната дейността на д-р Василев включва активно участие в управлението и работата на ЯМР лабораторията при ИОХ-ЦФ БАН, системно администриране и поддръжка на наличните ЯМР спектрометри и изчислителен клъстер МАДАРА, активна образователна и консултативна дейност в областта на ЯМР спектроскопия и изчислителна химия в рамките на БАН и други академични институции в България. Кандидатът е водил лекции и семинари по ЯМР спектроскопия в СУ, ХТМУ и ЮЗУ, и е ръководител е на успешно защитил 1 докторант.

През своята професионална кариера д-р Василев е участник в 3 международни научни проекта; ръководител на 1 и участник в 7 проекта финансирани от МОН и ФНИ; и участник в 1 научно-приложен проект (Договор със Софарма и Виталайф на тема "Установяване ни/или потвърждаване на структурата на лекарствени субстанции посредством снимане и интерпретация на ЯМР-спектри). Кандидатът участва с проект на тема „Комбиниран ЯМР/*in silico* подход за установяване и доказване на молекулни структури и взаимодействия при дизайн на нови материали“ в конкурса на Фонд „Научни Изследвания“-2016. Д-р Василев е рецензент за специализирани научни списания, член е на Специализиран Научен Съвет по Теоретична и изчислителна химия към ВА и на Научения съвет в ИОХ-ЦФ при БАН (от 2008 г.- до сега), и участва в научни журита.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представените научните постижения и дейности на д-р Василев са в съответствие с областта на обявения конкурс за присъждане на академичната длъжност „Професор“. Приложените материали по обявения конкурс ми дават основание да смятам че д-р Василев е изграден учен в областта на ЯМР спектроскопията. Представените от д-р Василев данни и постижения напълно отговарят на изискванията на Закона за развитието на академичния състав в България и допълнителните критерии на ИОХ-ЦФ за заемане на академичната длъжност „Професор“. Това ми дава основание да препоръчам на почитаемите членове на Научното жури да присъдят на доц. д-р Николай Василев академичната длъжност „Професор“ по професионално направление „Химически науки“.

Порто, 12.02.2017 г.

Рецензент: 
(Г. Иванова)