

РЕЦЕНЗИЯ

от от дхн **Светлана Димитрова Симова**, професор в ИОХЦФ-БАН
на материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност
‘професор’ в ИОХЦФ - БАН

в област на висше образование .“4. Природни науки, математика и информатика“,
професионално направление .“4.2. Химически науки“,
по научната специалност „Органична химия“

В конкурса за ‘професор’, обявен в Държавен вестник, бр. 79 от 07.10.2016 г. и в интернет-страницата на ИОХЦФ - БАН за нуждите на лаборатория „Център по ЯМР спектроскопия“ като единствен кандидат участва **доц. д-р Николай Георгиев Василев** от лаборатория „Център по ЯМР спектроскопия“

1. Общо представяне на получените материали

Със заповед № НО-05-05-22 от 13.12. 2016 г. на Директора на ИОХЦФ-БАН съм определена за член на научното жури на конкурс за заемане на академичната длъжност **‘професор’ в ИОХЦФ-БАН** по област на висше образование “4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление “4.2. Химически науки“, по научната специалност „Органична химия“, **обявен за нуждите на лаборатория „Център по ЯМР спектроскопия“**

За участие в обявения конкурс е подал документи **единствен кандидат**:

доц. д-р Николай Георгиев Василев

Представеният от доц. Василев комплект материали на хартиен и електронен носител е в съответствие с Правилника за развитие на академичния състав на ИОХЦФ-БАН, и включва следните документи:

- Молба до Директора на ИОХЦФ за участие в конкурса.
- Автобиография по европейски образец.
- Диплома за висше образование (копие).
- Диплома за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ (копие).
- Удостоверение за заемане на длъжността „доцент“ в ИОХЦФ.
- Автореферат на дисертацията за придобиване на образователната и научна степен „доктор“.
- Списък и копия от научните трудове.
- Списък на участия в научни конференции.
- Списък на забелязаните цитати.
- Информация за участие в изследователски проекти.

- Информация за преподавателската ми работа, ръководството на дипломанти и докторанти.
- Кратка информация за научноизследователската работа - основни приноси в даденото направление и перспективи за следваща изследователска работа.
- Приложените по-горе документи са представени и на електронен носител

Д-р Василев е приложил общо 96 научни труда. В съответствие с ППЗРАСРБ приемам за рецензиране 55 публикации, излезли след първата хабилитация. От тях 49 са публикувани в международни списания с импакт фактор (IF), пет са в български списания без IF и една е рецензия за книга. Не се рецензират представените 41 научни труда, като следва да се отбележи, че общият брой от цитиранията на кандидата досега е 304 с h-фактор =11.

Представена е информация за участия в изследователски проекти, в научни конференции, за преподавателска дейност, които отразяват цялостната дейност на кандидата по научната специалност.

Документацията представена от доц. Василев по конкурса е добре оформена и съдържа необходимата информация. Следва да се отбележи, че не са добре разграничени постиженията преди и след избора за доцент.

2. Кратки биографични данни (на кандидата/-ите)

Доц. Василев в роден в София, България. Завършва 35 Руска езикова гимназия, а висшето си образование получава в Химическия Факултет на СУ „Климент Охридски“ със специализация по химична физика и теоретична химия. Постъпва на работа като химик в ИОХЦФ-БАН през 1988 г., а на следващата година спечелва конкурс и става редовен докторант с научни ръководители от ИОХЦФ и СУ. Получава научната и образователна степен доктор през 1994 г., след което последователно заема научен сътрудник II-I степен. Гостува като изследовател в Университетите в Ексетър (три месеца през 1995 г.) и в Йорк (18 месеца през 2001-2002 г.), Великобритания. От 2003 г. е доцент в ИОХЦФ-БАН.

3. Обща характеристика на дейността на кандидата

Основен акцент в изследванията на д-р Василев е т.н. “Интелигентен” ЯМР, методите за установяване на структура и динамика на молекулни системи на атомно ниво посредством съвместно използване на ЯМР и теоретични методи, като обръща особено внимание на изследванията на динамични системи, изискващи работа при променлива температура. Подчертан е и интересът към изследване на съединения, съдържащи фосфор, платина и паладий. Доц. Василев има преподавателски опит в ХТМУ, СУ “Климент Охридски“ и Югозападен Университет „Св. Неофит Рилски“. Значителна част от времето си доц. Василев посвещава на поддръжката и програмното осигуряване на двете инфраструктури в

ИОХЦФ-БАН - компютърния комплекс „Мадара“ и спектрометрите в Центъра по ЯМР спектроскопия, което му позволява да използва детайлно възможностите им в научните си дирения, като и да установява значителен брой сътрудничества с колегите, използващи инфраструктурите.

Оценка на научната и научно-приложна дейност на кандидата

Основно изискване за заемане на академичната длъжност ‚професор‘ в ИОХЦФ-БАН е кандидатите да имат ясно очертана тематика, в която да е водещ изследовател. Доц. Василев е изявен специалист с ясно очертан профил на научните и научно-приложните изследвания. Основните професионални компетентности могат да се формулират като:

- Развитие на ЯМР методологията
- Комбинирано използване на методите на динамичната ЯМР спектроскопия и методите на изчислителната химия
- Приложение на ЯМР спектроскопията за изследване на не-равновесни процеси

Приноси (научни, научно-приложни, приложни) и цитирания

Научните приноси на доц. Василев могат да се обобщат в няколко научните направления отговарящи на научните му интереси в последните години:

– Посредством методите на динамичната ЯМР спектроскопия и на изчислителната химия е получено много добро съответствие между теоретичните и експериментални стойности за бариери на ротация на амиди, при платинови и паладиеви комплекси на тиамиди на глицин и за атропизомери на бифенил, което е указание за надеждността на използвания метод.

– Той е приложен при предсказване свойствата на нови хирални фосфин-бензенкарбоксамидни лиганди, получени при използването на природния алкалоид цитизин. Показано е, че конформационното поведение на лигандите оказва влияние на каталитична им активност в паладий катализираното асиметрично алилно алкилиране, като най-висока енантиселективност е постигната с конформационно хомогенния лиганд. Допълнително е проучено формирането на комплексите на лигандите с паладий с помощта ³¹P ЯМР-спектроскопия, като е установено, че равновесието между P,O-хелатираните и P,P-нехелатираните комплекси силно зависи от съотношението между лиганд и паладий.

– Аналогичен подход е приложен и за доказване структурата на паладиеви NHC комплекси с бидендатни N- и P-донорни лиганди с приложение като ефективни органични катализатори. Изясняване на конформационното разпределение както в основно състояние,

така и в преходните състояния при ротация около C-N и около Pd-C връзките може да помогне за предвиждане на връзката структура – каталитична активност.

– Получени са серия от паладий и платина NHC комплекси на базата на заместени 1,8-нафталимиди с различни алилови лиганди с потенциално приложение като катализатори, като структурата и конформационното разпределение са еднозначно определени посредством експериментални и теоретични изследвания, като е определен и механизма на обменния процес в тези комплекси като затруднена ротация около връзката Pd-C, а са изключени алтернативните механизми - ротация на алилов лиганд и *син-анти* обмен. За други кондензирани паладиеви NHC комплекси е доказан друг механизъм на обмен вероятно поради значително стерично пречене.

– С помощта на ЯМР спектроскопия успешно са проследени кинетиката на няколко органични реакции - хидролиза на иминохидантоини и получаване на тиодихидроурацил и 4-иминотиодихидроурацил посредством киселинно хидролизирана вътрешномолекулна атака от β -фенилтиоуреидо към amidна група чрез формиране на шест- и пет-членни циклични интермедиати посредством ^1H ЯМР, както и на механизма на фосфорилиране на 3-ацил кумарини посредством ^{31}P ЯМР.

– Разработена е програма за автоматизиране на определянето на химичните отмествания наречен FAFOMA на базата на нов алгоритъм за разпознаване на образи. Предимството на предложения метод пред наличните до публикуването му е решаването на проблема с разпознаването на припокриващи се мултиплети.

– Разработен е нов метод за подобряване на отношението сигнал към шум чрез автоматична корекция на шумовите отскоци във времевата област на ЯМР спектър. При прилагане на тази процедура с използване на сравнителен сигнал може да се получи редуциране на шума до три пъти.

– Експертни научни приноси са свързани с доказване и охарактеризиране на структури, които могат да се отнесат към дизайна на нови материали и лекарствени средства – конфигурационна *E,Z*-изомерия в имино-имидазолидинони; конформационно разпределение в 3-(заместени фенилууреидо)оцетни киселини и техните аниони; сложни спинови системи при циклизация на 3-(3-фенилууреидо) киселини.

– В 32 публикации доц. Василев е съавтор главно при характеризиране на голям брой нови синтетични съединения, като приносния му характер основно се състои в обучение на съавторите в коректната интерпретация и описание на рутинни ЯМР спектри.

Научно-приложна дейност

Доц. Василев участва в научно-приложни разработки главно с компетентността си в ЯМР спектроскопията като снимане и интерпретация на ЯМР спектри за нуждите на индустриални партньори. Регулярно той извършва анализи за фирма „СиПиЕй“, както и анализи при проблеми във флотационната индустрия – фирмите Арубис АД, Мед-Елаците АД и други. Допълнително значителна част от дейностите, които доц. Василев извършва могат да се характеризират като научно приложна-дейност. Това са както поддръжката и обучението на спектрометрите и компютърния комплекс, така и поддръжката на електронната поща на института.

4. Оценка на личния принос на кандидата

Доц. Василев притежава висока квалификация в областта на научните си интереси и вън от всякакво съмнение е, че получените научни резултати са негово лично дело или резултат на взаимноизгодно научно сътрудничество, в което неговия принос е несъмнен и в редица случаи водещ.

5. Критични забележки и препоръки

Имам някои препоръки към доц. Василев. Пожелавам му да се концентрира в по-малко на брой научни изследвания по актуалните тематика, които изследва и да се стреми към публикуване на научните резултати преимуществено в списания с висок импакт фактор.

6. Лични впечатления

Познавам доц. Василев от студентските му години като дипломант в лабораторията. Той разполага със значителни познания в редица научни области и борави свободно със съвременната компютърна техника. Независимо от това смятам, че той има значително по-голям капацитет, който не винаги пълноценно използва.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Документите и материалите, представени от доц. д-р Николай Василев **отговарят на всички** изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и съответния Правилник на ИОХЦФ-БАН.

Кандидатът в конкурса е представил **значителен** брой научни трудове, публикувани след материалите, използвани при първата хабилитация. В работите на кандидата има оригинални научни и научно-приложни приноси, които са получили международно признание

като част от тях са публикувани в списания, издадени от международни академични издателства. Теоретичните разработки имат практическа приложимост, като част от тях са пряко ориентирани към учебната работа. Научната и преподавателската квалификация на доц. д-р Николай Василев е несъмнена.

Постигнатите от **доц. д-р Николай Василев** резултати в научно-изследователската, научно-приложната и учебната дейност **надвишават** специфичните изисквания на ИОХЦФ-БАН, приети във връзка с Правилника на БАН и ИОХЦФ за приложение на ЗРАСРБ.

След запознаване с представените в конкурса материали и научни трудове, анализ на тяхната значимост и съдържащи се в тях научни и научно-приложни приноси, намирам за основателно да дам своята **положителна** оценка и да препоръчам на Научното жури да изготви доклад-предложение до Научния съвет на ИОХЦФ за избор на

доц. д-р Николай Георгиев Василев

на академичната длъжност 'професор' в ИОХЦФ-БАН по професионално направление 4.2. „Химически науки“ по научната специалност „Органична химия“

17.02.2017 г.

Рецензент:

/проф. дхн Светлана Симова/