

С Т А Н О В И Щ Е

по **конкурса за професор** по професионално направление 4.2 Химически науки
(Физикохимия)
обявен в Държавен вестник, бр. 32 от 22. 04. 2016 г.

от доц. д-р **Анела Николова Иванова**, СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет по
химия и фармация, член на научно жури назначено със заповед № Р33-2015
от 16. 05. 2016 г. на Ректора на ПУ „Паисий Хилендарски“

В рамките на срока по обявения конкурс е постъпила една кандидатура – на доц. д-р Васил Борисов Делчев. Кандидатът работи повече от 9 години като „доцент“ по Физикохимия в катедра Физикохимия на ПУ „Паисий Хилендарски“. От три години е „доктор на науките“ в същата област. На разположение са всички необходими документи по процедурата, както и информация по редица допълнителни показатели свързани с конкурса.

Доц. Делчев има общо 76 специализирани публикации в научната си кариера, 51 от които в списания с импакт фактор. За участие в конкурса представя 52 публикации, като 37 от тях са в международно реферирани издания и 31 от работите в международни списания са излезли след конкурса за „доцент“. От подадените за участие в конкурса научни публикации 26 (18 в реферирани и 16 в международни източници) не са били част от друга процедура по академично израстване. Затова в съгласие със закона вниманието ще бъде съсредоточено върху тях при обобщаване на научните приноси на кандидата. Те са получили до момента отзвук в научната литература с 26 цитата. Общият брой цитирания на работите на доц. Делчев според базата данни InCites на Thomson Reuters е 188. 154 цитата от забелязаните от автора върху публикациите, подадени за участие в конкурса, не са представяни на други конкурсни процедури. Тези показатели покриват общите наукометрични изисквания на Правилника за РАС на ПУ, както и допълнителните на Химически факултет.

Научната дейност на доц. Делчев е съсредоточена главно в две направления: 1) квантовохимично описание на енергетиката в основно и възбудено състояние на биоактивни молекули с акцент върху предлагане на вероятни пътища за пренос на енергия между възбудени или възбудено и основно електронно състояние (15 работи); 2) моделиране на молекулната структура и електронни характеристики на органични молекули (изолирани или в присъствие на една до няколко експлицитни молекули разтворител) (8 работи). През последните години се забелязва разширяване на изследванията към теоретично характеризирани на метал-органични комплекси (3 публикации). Използвана е изчислителна методология най-вече от областта на Теория на функционала на плътността, а в някои от по-новите съобщения са включени и резултати от електронно-корелирани методи от по-високо ниво базирани на вълновата функция. Като молекулни обекти са избрани главно нативни и модифицирани ДНК/РНК бази, някои биоактивни съединения, както и няколко органични молекули, за които е характерна тавтомеризация чрез протонен пренос. По-ранните изчислителни работи (№ 35-37) са съсредоточени върху определяне на ефекта от промяна на квантовохимичния метод или добавяне на поляризационни и дифузни функции в атомния базис върху

молекулната структура на тавтомери получени чрез вътрешно- (ацетилацетон, оксалоцетна киселина) или междумолекулен (аденин-молекула алкохол) пренос на протон. Дадени са и приблизителни оценки на енергетичните бариери за протонен трансфер. Впоследствие (№ 44) са изучени и ротамери на ацетилацетон, за които е предложено преобразуване през възбудено $^1\pi\pi^*$ състояние и са указани ориентировъчни позиции на конично сечение. Също така е показано (№ 64), че преносът на протон се затруднява при включване на молекула ацетилацетон в кухината на циклодекстрин. Изучаването на нуклеобазите е разширено (№ 50, 55, 59, 62, 63, 65, 66) към гуанин, урацил, цитозин и тимин. Симулирани са повърхнините на потенциалната енергия при вариране на различни дължини на връзки, чрез което са обяснени редица изомерни вътрешномолекулни превръщания. В една от работите е изследвана и енергетиката на димеризация, а в две публикации е отчетен ефектът на една или няколко водни молекули. Постепенно е развит и изчислителният протокол към по-точни подходи. Изследванията като цяло също еволюират откъм комплексност и задълбоченост. Една препоръка към кандидата би била да поставя по-конкретно направените изчисления в контекста на съществуващите в литературата квантово-химични оценки за изследваните системи, за да може по-ясно да се открие новото. В подобна на гореописаната посока са и молекулните симулации на възбудени състояния на няколко молекули с фармацевтична активност – барбитурова киселина, псевдофедрин (№ 53, 58, 60, 61, 67, 68, 70), за които също са намерени пътища за изомерно превръщане или структурни деформации. В повечето изследвания е търсена и връзка на релаксационните пътища с характеристики получени от експериментално измерени UV спектри. Пресмятанията на метал-органичните комплекси (№ 71, 73, 75) имат най-вече за цел структурно описание на молекулно ниво и оценка на някои енергетични аспекти.

Като обобщение може да се каже, че през последното десетилетие кандидатът се е специализирал в намиране на ключови конични сечения, с помощта на които се обясняват вероятни механизми за преминаване на молекулите между различните електронни състояния. Това е научно направление, което доц. Делчев развива активно и самостоятелно. Има h-фактор 8 според ISI Web of Science и 7 според SCOPUS. Участвал е в 6 университетски (ръководител на 2) и 4 национални (ръководител на 1 за млади учени) научно-изследователски проекта и е работил по 3 чуждестранни проекта. Бил е на специализации в 3 чуждестранни университета – в Австрия, Германия и Турция.

По проблеми от първото научно направление са провели научни изследвания двама докторанти. Доц. Делчев е бил научен ментор на 1 успешно защитил докторант на самостоятелна подготовка в УХТ-Пловдив и научен ръководител на една редовна докторантка, която е отчислена с право на защита. Ръководил е 5 успешно защитили дипломанти и има 2 текущи. Също така кандидатът участва в преподавателска дейност, като всяка година води лекционни, семинарни и практически занятия. Средната му годишна учебна натовареност през последните 5 години е около 300 часа, от които мин. 90 ч. лекционни. Доц. Делчев води лекции на бакалаври по Квантова химия и по Квантовохимични методи, а от 2013 г. е и лектор по Физикохимия I. Разработил е упражнения по първите две дисциплини, помага за обновяване и на упражненията по Физикохимия. За конкурса са представени две авторски печатни учебни помагала – „Квантова химия“ (изд. 2016 г.) и „Квантовохимични методи“ (изд. 2010 г.). Подготвени са и електронно достъпни за студентите лекции и семинари по Физикохимия I.

В заключение, представените по конкурса материали покриват всички изисквания на ЗРАСРБ, Правилника за РАС на ПУ „Паисий Хилендарски“ и допълнителните изисквания на Химически факултет за заемане на академичната длъжност „професор“. Това ме мотивира да дам положителна оценка на кандидата по процедурата и да гласувам „за“ избирането му на тази длъжност.

23. 08. 2016 г.

Член на научното жури:

/доц. д-р А. Иванова/