

Рецензия

във връзка с конкурс за заемане на академичната длъжност „професор” в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия), обявен в ДВ, бр. 32 от 22.04.2016г.

Със заповед Р33-2015/16.05.2016 год. на Ректора на Пловдивския университет “Паисий Хилендарски”, проф. д-р Запрян Козлуджов, съм избрана за член на Научното жури, съставено във връзка с конкурса за заемане на академичната длъжност (АД) „професор” в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия), обявен в ДВ, бр. 32 от 22.04.2016г. Съгласно Протокол № 1/29.06.2016 год. от първото заседание на Научното жури бях определена за „рецензент“ и в това си качество изготвих настоящата рецензия.

Молба за участие в конкурса за АД „професор“, придружена с необходимите документи по чл. 76 от ПРАСПУ е подал един кандидат: **доц. дн Васил Борисов Делчев**.

Описание на представените от кандидата материали

Доц. дн Васил Борисов Делчев е подготвил и представил изчерпателна и много прецизно подредена документация, която съдържа всички необходими материали, указани в чл. 76 на Правилника за развитието на академичния състав в Пловдивския университет “Паисий Хилендарски”, Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за неговото приложение и Закона за висшето образование, а именно: Молба по образец до Ректора на ПУ за участие в конкурса, Декларация за оригиналност и достоверност на приложените документи, Автобиография по европейски формат; Копие на диплома за образователно-квалификационната степен «магистър»; Копие на диплома за придобита образователна и научна степен “доктор”; Копие на свидетелство за АД «доцент»; Копие на диплома за придобита научна степен «доктор на науките» (дн); Списъци на научните трудове, цитирания, участия в конференции и проекти; Справка за спазване на специфичните изисквания на съответния факултет, съгласно чл. 76(4) на ПРАСПУ; Резюмета на материалите по чл. 76 от ПРАС на ПУ; Самооценка на приносите; Преписи от протоколи на заседания на КС, ФС, АС, отнасящи се до конкурса; Служебна бележка (НПД) за научно-изследователска дейност; Справка за учебна дейност; Удостоверение от Декана на ХФ за осигурени учебни часове; Удостоверение за трудов стаж; Диплома и заповеди за зачисляване и отчисляване на докторанти.

Биографични данни, образование и професионален опит на кандидата

Васил Борисов Делчев е роден на 04.11.1975 год. в гр. Пловдив. В периода 1993-1998 год., той се обучава в Химическия факултет на Пловдивския университет "Паисий Хилендарски" по специалност „Химия“. През 1998 год. кандидатът завършва пълния курс на обучение с отличен успех и придобива образователно-квалификационната степен „магистър“ с професионална квалификация „химик-органик и учител по химия и органична технология“. Веднага след завършването на висшето си образование Васил Делчев започва изследователска и преподавателска работа в катедра „Физикохимия при ХФ на ПУ. В периода 2000-2004 год. Васил Делчев е избран последователно за асистент (2000г.), старши асистент (2003г.) и главен асистент (2004г.) към катедра „Физикохимия“ на ХФ при ПУ. В 2002 год., след успешна защита на дисертационен труд на тема *«Електронна структура и вибрационни спектри на 1,3-пропандиал и 2,4-пентандион и тавтомерните им енолни форми»*, Висшата атестационна комисия към Министерски съвет на РБългария присъжда на Васил Борисов Делчев образователната и научна степен “доктор” по научната специалност „Теоретична химия“. В 2007 год., след успешно издържан конкурс, ВАК дава на Васил Борисов Делчев научното звание «доцент» по научната специалност „Теоретична химия“. Следват специализации на кандидата в Техническият университет на Виена, Австрия (1999-2000г) в групата по Молекулна спектроскопия на проф. Гюнтер Бауер и в Техническият университет на Мюнхен, Германия (2008-2009г.) в групата на проф. Волфганг Домке). Проведените специализации в изброените реномирани научни институции са дали възможност на кандидата да проведе стойностни научни изследвания, резултатите от които са публикувани по-късно в международни научни списания и вече са многократно цитирани. В същото време, съвместната научна работа с водещи учени в областта на теоретичното и спектроскопското изследване на структури и на механизми на фотореакции на органични съединения е допринесла много за изграждането и оформянето на изследователския профил на кандидата като специалист по изчислително моделиране на биомолекули и техни реакции в основно и възбудено електронно състояние. В 2013 год. след убедителна защита пред Научно жури на дисертационен труд на тема *«Изследване на водородните връзки, протонния пренос и релаксационните механизми на възбудените състояния на β -карбонилни и ароматни биоорганични съединения»*, Пловдивският университет «Паисий Хилендарски» заслужено присъжда на доц. д-р Васил Борисов Делчев научната степен «доктор на науките» в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, по професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия-Квантова химия).

Обща характеристика на научно-изследователската дейност на кандидата

За участието си в конкурса за АД „професор“, доц. дн Васил Борисов Делчев е представил 52 научни труда. По данни на кандидата, 37 от тях са в списания с импакт

фактор (ИФ) и 15 са в списания без ИФ. От публикациите в списания с ИФ, 19 не са били използвани в предишни процедури, 11 са участвали в процедурата за научната степен „доктор на науките“, 4 - в процедурите за АД „доцент“ и научната степен „доктор на науките“, 2 - в процедурите за АД „доцент“ и научната степен „доктор“ и 1 - в процедурата за АД „доцент“. От 15-те статии в списания без ИФ, 8 не са използвани в процедури, 4 са използвани в процедурата за научната степен „доктор на науките“, 2 - в процедурата за АД „доцент“ и 1 - в процедурите за АД „доцент“ и научната степен „доктор на науките“. След заемането на АД „доцент“ са публикувани общо 42 научни труда, от които 30 са в списания с ИФ и 12 са в списания без ИФ. От анализа на цитиранията на статиите за участие в конкурса, които са 194, се вижда, че 154 цитата не са били представяни до сега за участие в процедури, 26 са били представяни в конкурса за „доктор на науките“, а 14 – в конкурса за АД „доцент“. 160 от цитатите са в специализирани международни списания, 13 са в глави на книги в чужбина, 18 са в дисертации в чужбина, и 3 - в дипломни работи в чужбина.

Общият брой публикации на кандидата е 76, от които в международни списания с ИФ - 49, в международни списания без ИФ – 3, в български списания с ИФ – 2, в български списания без ИФ – 22. Общият брой забелязани цитирания на трудовете на кандидата е 254. Индексът на Хирш (h-индекс) съгласно базата данни „ISI Web of Knowledge“ е 8 (7 - съгласно базата данни „SCOPUS“).

С представените за участие в конкурса 52 научни труда (от които 37 в списания с ИФ), кандидатът изпълнява и многократно надвишава условията на Химическия факултет на ПУ, според които, за участие в конкурс за АД „професор“, се изискват 30 публикации, от които 20 в специализирани международни списания и поне 10 научни труда да са публикувани след заемане на АД „доцент“ (кандидатът има 42 труда, от които 30 в списания с ИФ). Броят на цитиранията на трудовете представени за участие в конкурса (194) също многократно надминава минималните изисквания на ХФ на ПУ за 50 цитирания.

Основни научни приноси

Основните научни приноси в публикациите на доц. дн Васил Делчев са в областта на теоретичното моделиране на важни за съвременната наука биоорганични съединения. Изследванията са проведени с цел изучаване на тяхната структура и структурни превръщания, някои спектроскопски параметри и най-вече на механизмите на техни реакции както в основно, така и във възбудено състояние. Най-ранните теоретични изследвания на кандидата са свързани с изучаването на електронната и геометричната структура и структурните превръщания на β -дикарбонили (малоналдехид, ацетилацетон, 3-оксопропионил халогениди, β -цистеаминилмалонова киселина), както и на механизмите на кето-енолна тавтомерия в газова фаза. Изчисленията са проведени с подходящи за целта изчислителни техники, основно с *ab initio* и DFT методи. Изучени са механизмите на

реакциите на вътрешномолекулен пренос на протон в редица биоорганични ароматни съединения (барбитурова киселина, аденин, урацил, цитозин и тимин). Локализираните са най-вероятните преходни състояния на реакциите и са оценени енергетичните бариери на възможните тавтомерни превръщания. Сравнително голям брой публикации на кандидата са посветени на моделирането на водородно свързани комплекси на споменатите съединения с вода, метанол и млечна киселина, с което е оценена ролята на разтворителя при процесите на пренос на протон. С DFT изчисления е изучен и предсказан най-вероятният механизъм (през енолната форма) на ацилиране на оксалоцетната киселина с ацетилцистеамин, а чрез сравнителен анализ на експериментални и изчислени (DFT) ^1H NMR параметри на различни изомери е предсказана най-вероятната структура на NXO-модифициран пептид.

На по-късен етап, теоретичните изследвания на кандидата бележат развитие и продължават с изследване на механизми на реакции, протичащи във възбудено състояние. Резултатите от изследванията и предсказанията на теорията за някои от изследваните обекти са потвърдени експериментално, което доказва правилния избор на теоретични подходи и стойността на проведените теоретични изследвания. С цел предсказване на най-вероятните механизми са изучени редица фотореакции с участието на β -дикарбонили, пиримидинови и пуринови производни, както и редица ароматни съединения. Предложени са механизми на процесите на фотоциклодимеризация на енолната форма на малоналдехида и на фоторазкъсването на вътрешномолекулярната водородна връзка в енолната форма на ацетилацетона (през $^1\pi\pi^*$ възбудено състояние). Предсказаните механизми на безизлъчвателна дезактивация на серия пиримидинови производни (урацил, 4-пиримидинон, (тио)барбитурова киселина, (изо)цитозин и 2,4-диаминопиримидин) обясняват високата фотостабилност на пиримидиновите нуклеобазы и фототавтомерията при техни производни. На основата на теоретичните изследвания е предсказано, че структурните превръщания на пиримидиновите нуклеобазы до стабилните им тавтомерни форми, както и фотоциклодимеризацията на две молекули урацил до цис-син циклобутанови димери и оксетанов димер се осъществяват през $^1\pi\pi^*$ възбудените състояния, докато фототавтомерията при пиримидиновите нуклеобазы и производни протича по реакционните пътища на $^1\pi\sigma^*$ възбудените състояния.

Изследванията във възбудено състояние са довели и до изясняване на механизмите на фотореакции на група пуринови производни. Намерен е енергетично най-изгодния (безбариерен) реакционен път, с който е обяснена фотостабилността на гуанина. За други две производни (ксантин и хипоксантин) са определени две конични сечения S_1/S_0 , с които е обяснено преминаването от $^1\pi\pi^*$ възбудените състояния до основно състояние.

Една публикация на кандидата е посветена на теоретичното изследване на водородно свързани комплекси на серотонина с вода, при което е намерена зависимост на вертикалните енергии на възбуждане от присъствието й. В друга публикация е изследван преноса на протон в 3,5-динитрокатехол и са предложени механизми за протичането му

във възбудено електронно състояние. За два позиционни изомера на хидрокси-метил-пиридина са предсказани механизмите на преминаване от възбудено до основно състояние. Теоретично са предсказани ниско енергетичните конформери на 2-фенилетанола, които са потвърдени и експериментално с МАТІ спектроскопски изследвания. С *ab initio* изчисления (CC2, CASSCF) на адиабатните енергии на възбуждане и моментите на преходите за различни конформери са обяснени вибронните спектри на «гъвкавата» молекула на псевдоефедрина.

Наред с изучаваните органични биомолекули, обект на изследване през последните години, са били и някои метални комплекси, на Pt(II), Fe(II) и Fe(III). Изчисленията на Хартри-Фок ниво са довели до предсказването на най-вероятната конфигурация на комплекса на Fe²⁺ с 4-нитрокатехол и 2,3,5-трифенил-2Н-тетразол, както и на комплекса на Fe³⁺ с неутрални и депротонирани лиганди [3,3'-(3,3'-диметокси-4,4'-бифенилен)бис[2,5-ди(4-нитрофенил)-2Н-тетразолиев] хлорид и неотетразолиев хлорид.

Следва да се отбележи, че научните трудове на доц. Делчев обхващат впечатляващи по обем научни изследвания, провеждани системно и изчерпателно в сравнително кратък период от време, особено след хабилитацията през 2007 год. Тези изследвания определят кандидата като учен-изследовател със старателно подържан интерес в областта, притежаващ задълбочени фундаментални познания, умело приложени за решаването на важни научни проблеми. След прегледа на материалите по конкурса става ясно, че както идеите, така и изпълнението на многобройните изчислителни задачи са негово лично дело.

Доц. дн Васил Делчев е самостоятелен автор на два учебника за студенти („Квантова химия“ и „Квантовохимични методи“), на един електронен свитък лекции по „Физикохимия, I част“, както и на две учебни помагала за ученици. Той е съавтор на три други учебни помагала за студенти: Задачи и въпроси по физикохимия (I част), Задачи и въпроси по физикохимия (II част) и Упражнения и задачи по приложна физикохимия (магистърски курс).

Участия в научни конференции и проекти

Резултатите от научните изследвания на доц. дн Васил Делчев са били представяни многократно на национални и международни научни форуми. Кандидатът е представил списък с участия на: 10 международни конференции, 30 форума с национален обхват и на научни семинари, от които 1 в Дрезден, 1 в Хановер, 2 в Одрин и 1 във Виена.

Участието на доц. дн Васил Делчев в научно-изследователски проекти е пряко свързано с тематиката на научно-изследователската му дейност и заеманите от него позиции през годините. В периода 2002-2009 год., кандидатът е участвал в три международни проекта: два научно-изследователски проекта на ТУ Виена, Австрия (2002-2005), в рамките на които е провеждал изследвания свързани с изчисляването и интерпретирането на вибрационните спектри на органични молекули, и един проект на

Техническият университет в Мюнхен, в периода 2008-2009 год., в рамките на който започват изследванията на кандидата по структури на биомолекули и механизми на реакции, протичащи във възбудено електронно състояние. В периода 2002-2006 год., доц. дн Васил Делчев е бил ръководил още на три проекта финансирани от МУ(ПУ), които обхващат изследвания на реакции с пренос на водороден атом и изучаване на структурата и вибрационните спектри на водородно свързани комплекси на биомолекули. Понастоящем (2015-2016), кандидатът е ръководител на проект свързан с изследвания на някои фотохимични, каталитични и твърдофазни системи с потенциално приложение в съвременните технологии. Приложен е списък на още 8 проекта (финансирани от ФНИ(ПУ) и НИС – УХТ и ръководени от други учени), в рамките на които доц. дн Васил Делчев е провеждал научни и научно-приложни изследвания свързани с неговата компетентност по изчислително моделиране.

Оценка на учебната работа на кандидата

Доц. дн Васил Делчев е представил изчерпателна информация за подготовените от него лекционни курсове за студенти от различни специалности на катедра „Физикохимия“ към Химическия факултет на ПУ „Паисий Хилендарски“: „Квантова химия“, „Квантовохимични методи“, „Квантовохимично моделиране“, „Физикохимия“ и „Химия“. Той е ръководил още на семинари и упражнения по „Квантова химия“, упражнения по „Квантовохимични методи“ и семинари и упражнения по „Физикохимия, I и II част“.

Доц. дн Васил Делчев е научен ръководител на 7 (седем) дипломанта, от които 5 (пет) са защитили успешно и 2-ма са настоящи. Кандидатът е научен ръководител на двама докторанта по научната специалност „Физикохимия“, единият от които е защитил, а другият е отчислен с право на защита към датата на подадените документи (изискването на ХФ на ПУ е кандидатът да е имал научно ръководство на поне един докторант).

От казаното по-горе и от приложените документи става ясно, че доц. дн Васил Делчев е отлично подготвен лектор по специалностите „Теоретична химия“ и „Физикохимия“. Той притежава необходимите фундаментални теоретични познания и педагогическа практика и безспорно е много подходящ кандидат за заемане на академичната длъжност „професор“ в катедра „Физикохимия“ към Химическия факултет на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“.

Експертна дейност на кандидата

Научната компетентност на доц. дн Васил Делчев в областта на теоретичното моделиране е била забелязана и оценена както на национално, така и на международно ниво. Прегледът на приложените материали показва, че той е бил рецензент на: а) научни статии представени за публикуване в редица научни списания: J. Mol. Struct. (8) J. Mol. Mod. (1), Asian Chem. Lett.(3), J. Struct. Chem. (3), J. Am. Chem. Soc. (1), Spectrochim. Acta

A (4), J. Comput. Chem. (1), Comput. Theor. Chem.(2), J. Phys. Chem. (1), J. Electron. Spectr. (1), б) на статия от сборника с отчетните доклади на проектите към изчислителния център на ТУ-Мюнхен, както и в) на една дипломна работа и четири научни труда на ПУ. Доц. дн Васил Делчев е участвал като член и експерт в 4 (четири) научни журита по процедури за АД “доцент” (2) и по процедури за придобиване на ОНС “доктор” (2).

Критични бележки и препоръки

Критични бележки към представените научни изследвания и публикации нямам. Препоръчам на кандидата при бъдещата му научно-изследователска работа все така системно и целенасочено да прилага изчислителния апарат на теоретичната химия като обогатява изследванията си с нови интересни обекти и процеси, както и с авангардни изчислителни подходи. По отношение на педагогическата работа, препоръчам на доц. дн Васил Делчев отговорно, и на високо научно ниво да преподава натрупаните знания и опит на бъдещите поколения студенти в катедрата по «Физикохимия» към Химическия факултет на ПУ «Паисий Хилендарски».

Лични впечатления и становище на рецензента

Познавам доц. дн Васил Борисов Делчев от студентските му години в Пловдивския университет. Още тогава, той се отличаваше с любознателност, впечатляваща инициативност и лекота при усвояване на лекционния материал в една не много лесна за възприемане дисциплина, каквато е изчислителната химия. Той имаше ясна визия за своята бъдеща професионална ориентация и кариерно развитие в научната сфера. На настоящия етап от неговото научно израстване, със задоволство констатирам, че през изминалите години той е работил много упорито, системно и целенасочено в областта на компютърното моделиране на биосистеми и механизми на техни реакции в основно и възбудено състояние, получил е значими и много добре цитирани в международната литература резултати и е натрупал богат професионален опит като преподавател. Освен задълбочени фундаментални познания в областта, той притежава и добри комуникационни и организационни умения придобити по време на съвместната му научно-изследователска работа с колеги от различни национални и международни научни институции, ръководството на научни проекти, както и работата му като университетски преподавател. При мои лични срещи и разговори с проф. Волфганг Домке (ТУ-Мюнхен) и проф. Бауер (ТУ-Виена), при които кандидатът е специализирал, имах удоволствието да науча, че доц. Делчев е оставил отлични впечатления със своята отговорна и задълбочена научна работа и старание за усвояване на нови изследователски подходи в областта на теоретичното изследване на биомолекули и техни реакции. Всичко казано до тук ми дава основание безрезервно да го подкрепя при избора му за АД „професор“ по Теоретична химия в Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“.

Заклучение. В конкурса за АД «професор», доц. дн Васил Делчев се представя с впечатляваща за неговата възраст научна и преподавателска дейност и наукометрични показатели, които многократно надминават изискванията на ПУ за тази академична позиция. Проведените от кандидата изследвания се отличават с ясна насоченост в актуална за химичната наука тема, проведени са на високо научно ниво и с подходящи теоретични методи. На основата на анализа на представените от доц. дн Васил Борисов Делчев документи, научни трудове, съдържащите се в тях научни, научно-приложни и методически приноси, имайки предвид учебната му практика, участието му в научни форуми и разработените от него научни проекти, убедено предлагам, доц. дн Васил Борисов Делчев да заеме академичната длъжност „професор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки (Физикохимия) в Пловдивския университет „Паисий Хилендарски”.

София, 11.08.2016 год.

Рецензент:

проф. д-р Наташа Средкова Трендафилова

Институт по обща и неорганична химия

Българска академия на науките