

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурса за професор по специалността 01.05.01 "Теоретична химия" за нуждите на лаборатория "Физична органична и изчислителна химия" към Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия – БАН, обявен в ДВ, бр. 45 от 14.06.2011 г. с единствен кандидат: **доцент дхн Венелин Георгиев Енчев**

Рецензент: доцент д-р Николай Георгиев Василев, научна специалност „Органична химия”, шифър 01.05.03, Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия, БАН

Кандидатът доцент дхн Венелин Георгиев Енчев се дипломира с много добър успех в Химическия факултет на Софийски университет “Св. Климент Охридски” през 1979 г., специалност химик-органик и след това с отличен успех завършва следдипломна специализация по теоретична химия. През 1985 г. успешно защитава **докторска дисертация** на тема *"Нови теоретични подходи за изследване на електронните преходи и електронните състояния в многоатомни спрегнати молекули"* в Института по органична химия – БАН с научен ръководител ст.н.с. II ст. д-р Филип Фратев. През 2006 г. придобива научната степен **доктор на химическите науки** по *научната специалност 01.05.01 „Теоретична химия”* след защита на дисертация на тема *"Тавтомерия и фототавтомерия при органични молекули"*. През 1982 г. кандидатът постъпва като редовен докторант в Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия, БАН, където протича и цялата му досегашна кариера от научен сътрудник III степен (асистент) през 1985 г. до старши научен сътрудник II степен (доцент) през 1998 г., която академична длъжност заема до сега. През годините той е бил и хоноруван преподавател в Шуменския университет “Епископ К. Преславски”, Технологичния колеж – Разград и в Пловдивския университет “Паисий Хилендарски”. През периода 2002-2004 г. е ръководител на лаборатория „Теоретична химия” в ИОХЦФ – БАН.

Доцент дхн Венелин Георгиев Енчев участва в конкурса за професор с 89 научни труда, 1 патент, 2 автореферата на дисертации и 10 научно-популярни публикации. От тези 89 научни труда 8 са включени в докторската му дисертация, а първите 41 в конкурса за доцент. В дисертацията за присъждане на научната степен доктор на химическите науки са включени 31 научни труда, а след защитата и са публикувани 17

статии. Всички публикации са по тематиката на конкурса, като повечето от тях са отпечатани в международни списания и/или списания с импакт фактор (IF). От представените публикации 16 са в списания без IF, като от тези 16 публикации 4 са в *Научни трудове на Русенския университет "Ангел Кънчев"*, 3 в *Годишник на Института за Чуждестранни Студенти*, а останалите са в международни списания, които все още не са придобили IF. В реномирани международни списания като *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)* (IF=1.288 за 2010 г.) кандидатът има публикувани 9 статии, в *Journal of Molecular Structure* (IF=1.599) - 9 статии, в *Journal of Physical Chemistry* (IF=2.732) - 9 статии, в *Structural Chemistry* (IF=1.727) - 4 статии, в *Chemical Physics Letters* (IF= 2.282) - 3 статии, в *Chemical Physics* (IF=2.017) - 2 статии и т.н. Прави впечатление факта, че публикациите на кандидата са отпечатани в разнообразни списания (общо 45 различни списания) в зависимост от тематичната насоченост на изследваните обекти.

В материалите по конкурса е представен сериозен списък от **520 цитата** на трудовете на доцент дхн Венелин Георгиев Енчев (Scopus изчислява **h-индекс = 10** на базата на 59 статии и 423 цитата, ръчното изчисляване на база на представените в материалите публикации и цитати дава **h-индекс = 13**). Прави впечатление цитирането на работите на кандидата в книги (35 пъти) и в обзори (18 пъти), което е атестация за качеството на научните изследвания. Най-цитирани са две статии: една в *Journal of Physical Chemistry* от 1993 г. и една в *International Journal of Pharmaceutics* от 2003, и двете с по 39 цитата.

По своя характер трудовете на доцент дхн Венелин Георгиев Енчев представляват приложение на методите на изчислителната химия за:

- **изследване на структурата и спектралните свойства на органични и комплексни съединения;**
- **изследване на ароматния характер на органични съединения;**
- **изследване на механизми на органични реакции и на тавтомерни равновесия и**
- **изследване на зависимостта структура-биологична активност/токсичност на веществата.**

В научната си работа доцент дхн Венелин Георгиев Енчев не се ограничава само до приложение на наличните теоретични подходи за целите на изясняването на структурата, спектралните свойства, механизмът на органичните реакции и на зависимостта структура-активност, но и е търсил обекти с потенциално практическо

приложение. Пример за това са изследванията по фотостабилността на индандиони и патентоването на потенциални фотопротектори.

Научните приноси на доцент дхн Венелин Георгиев Енчев могат да се формулират в следните три категории:

- формулиране на нови хипотези (методи),
- коригиране на хипотези,
- потвърждаване/допълване на хипотези.

Към формулиране на нови хипотези (методи) може да се класифицират следните приноси:

1. Предлагането на нов механизъм на реакцията на пренос на водороден атом в триплетно възбудено състояние при 5,8-диметилтетралона (Публикация №: 32).
2. Предлагането на двустадийен асинхронен механизъм за реакциите в диотропните системи N,N'-бис(салицилиден)-p-фенилендиамин, N,N'-бис(2-хидрокси-1-нафтилметил)-p-фенилендиамин и 2,2'-бипиридил-3,3'-диол (Публикации №: 40, 47).
3. Откриването на реакция с вътрешномолекулен пренос на протон във възбудено състояние при 2-ацетил-индан-1,3-дион (Публикация №: 46).
4. Откриването на рядко наблюдаван пренос на протон при 2-карбокси-индан-1,3-дион в твърдо състояние (Публикация №: 89).
5. Предлагането на нов индекс на ароматност (information aromaticity index) – индекс за описание на π -електронната делокализация в спрегнати органични молекули (Публикация № 1).
6. Предлагането на нов подход за теоретичен анализ на електронните преходи и електронните състояния, основаващ се на метода на частичните орбитали (Публикации № 7, 8, 12).
7. Предлагането на нова хипотеза, че във воден разтвор при pH = 7.8-10 съществува равновесие между различни тавтомерни форми на аниона AN3, а не между анионите AN1 и AN3 на 5-флуороурацил на основата на резултати от квантово-химични изчисления и експериментални резултати (Публикация №: 88).

Към втората категория (коригиране на хипотези) може да се класифицират следните приноси:

1. Коригирането на хипотезата, че при 4-нитрозопиразолоните съществува равновесие между две нитрозо форми като е показано е, че в разтвор съществуват syn- и anti-оксимни форми (Публикация № 82).

2. Опровергаване на твърдението на други автори, че 4-амино-тиазолидин-2-он съществува като имино тавтомер (Публикация №: 67).

3. Доказването чрез квантово-химичните резултати, ЯМР и кристалографските данни, че при кондензация на 2-ацетил-индан-1,3-дион с анилин не се получава Шифова база, а 2-[1-(N-фениламино)-1-етилиден]-индан-1,3-дион. По този начин са опровергани твърденията на други автори за структурата на съединението (Публикация №: 57).

Към третата категория приноси (потвърждаване/допълване на хипотези) може да се класифицират следните приноси:

1. Установяването, че 2-карбоксамид-индан-1,3-дион съществува под формата на два тавтомера, преминаващи много бързо един в друг. По стабилната тавтомерна форма на съединението е 2-(хидроксиамино-метилен)-индан-1,3-дион, като е предсказана изключително ниска бариера на тавтомерно превръщане (Публикация №: 69).

2. Доказването, че (3RS,4RS)-2-фенетил-3-(2-фурил)-4-(пирролидин-1-ил-карбонил)-3,4-дихидроизо-хинолин-1(2H)-он съществува в trans конфигурация, като в твърдо състояние има един конформер, а в разтвор – смес от два конформера (Публикация №: 74).

Научната продукция на доцент Енчев показва детайлно познаване на разглежданите проблеми и научната литература посветена на тях, както и на съвременните методи за експерименталното им и теоретично описание.

Научните трудове на кандидата са в авторски колективи, обединяващи както теоретици така и експериментатори, както студенти/докторанти така и опитни изследователи. Това е естествено желание за комбиниране на собствената експертиза с тази на специалисти в дадена друга научна област и за обучение на нови поколения научни работници. Нямам никакви съмнения относно творческия принос на кандидата във всяка една от тях.

Така формулираните приноси на кандидата съгласно квалификацията на бившата ВАК попадат към *"Формулиране или обосноваване на нова теория (хипотеза)"* и *"Доказване с нови средства на съществени нови страни в съществуващите научни проблеми и теории"*.

Познавам лично доцент дхн Венелин Георгиев Енчев и съм впечатлен от неговото трудолюбие, усърдие и колегиалност.

Освен хоноруван преподавател в няколко български университета, кандидатът е участвал активно и във втората и третата степен на обучение на студенти като е подготвил и обучил 8 дипломанта, 1 специализант и 3 успешно защитили докторанта.

Затова не е случаен фактът, че доцент Енчев е успял да формира научна група по "Теоретична химия" в ИОХЦФ, която заедно с други колеги успешно работи по изпълнението на международни проекти по ЕБР и проекти към Национален Фонд „Научни изследвания”.

Към представените ми за рецензия материали нямам критични забележки. Те отговарят на темата на конкурса, както по обем така и по качество, с което са спазени и дори надхвърлени препоръчителните показатели на правилника на ИОХЦФ за заемане на академичната длъжност „ПРОФЕСОР”.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ: Доцент дхн Венелин Георгиев Енчев представя достатъчна по обем стойностна научна продукция, публикувана в реномирани научни списания, която е намерила широк отзвук в литературата.

Той е изграден научен работник в областта на теоретичната химия, много добър организатор и ръководител на научни изследвания. Убедено препоръчвам на членовете на Научното Жури да гласуват с "Да" за заемане на академичната длъжност „ПРОФЕСОР” от доцент дхн Венелин Георгиев Енчев.

18.10.2011 г.

Рецензент:

(доцент д-р Николай Василев)