

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за заемане на академична длъжност „професор“

по научната специалност „Минералогия и кристалография (Структурна кристалография на органични и биологични вещества)“

обявен в „Държавен вестник“, бр. 21/2015

Кандидат: доцент д-р Борис Любомиров Шивачев, ИМК-БАН

Рецензент: професор дхн Людмил Манолов Антонов, ИОХЦФ-БАН

Общо описание на представените материали:

Съгласно предоставените ми материали по конкурса, доц. д-р Шивачев участва в конкурса с 43 научни публикации (от които 40 в национални и международни научни списания с импакт-фактор) и участие в 7 проекта финансирани от ФНИ и един от ЕК. Допълнително са описани и приложени 13 научни публикации, както и само са описани две публикации, издадени от Съвместния научен център на ЕК и притежаващи ISSN номера, които въпреки, че допълват общата представа за научна активност, нямат отношение към настоящия конкурс. Представен е списък с 211 цитата, които редуцирам на 194, изключвайки цитати, отбелязани като „CCDC Citations“, които според мен нямат смисъла на научен отклик в литературата. Изброени са участия в 32 научни прояви (5 устни и 27 постерни). Липсват данни за свидетелства и патенти. Тази активност обхваща периода 2010-2015г. след придобиване от кандидата на научното звание „старши научен сътрудник II степен“ (сега „доцент“) и следователно не е била обект на предходно рецензиране. Изключение от времевия интервал са публикации 41 и 43, които са публикувани през 2009, но също подлежат на рецензиране, тъй като не са използвани в конкурса за доцент. Не намирам за правилно да рецензирам научни публикации 6, 20 и 27, в които съм съавтор, без това да означава, че ги изключвам от материалите по конкурса.

Съгласно изисквания на Правилника за условията и реда за придобиване на научни звания и за заемане на академични длъжности в ИМК-БАН, раздел IV, чл. 44, ал. 4, 6 и 7, минималните изисквания за заемане на академичната длъжност „професор“ са 20 научни публикации (от които 10 в списания с импакт-фактор), 50 цитирания, научно ръководство на един защитил докторант приравнено към h-фактор 8.

От представените материали мога да направя да направя извода, че минималните изисквания са надхвърлени значително, както следва: 43 научни публикации при изискуеми 20; 40 научни публикации в списания с импакт-фактор при изискуеми 10; 194 цитирания при изискуеми 50. Съгласно приложената документация кандидатът е

ръководител на двама докторанти, за които не е представена информация, че са придобили научната степен „доктор“ към момента да подаване на документите в конкурса. Вместо това е представена справка от SCOPUS, в истинността на която лично се уверих, както в упоменатата базата данни, така и от списъка с цитиранията, за наличие на h-фактор 8, с което изискването на чл. 44, ал. 7 от Правилника е изпълнено.

Обща характеристика на научната, научно-приложната и педагогическата дейност на кандидата:

Доц. д-р Шивачев работи в областта на кристалографския анализ на органични молекули и органични и хибридни надмолекулни системи, което включва кристализация, провеждане на експеримент за събиране на данни, разшифровка и интерпретация на структурите. Чисто научният компонент е доминиращ, но са налице и сериозни научни-приложни елементи като разработване на приложен софтуер и усъвършенстване на научната апаратура. Детайлен анализ ще бъде направен по-долу.

Като резултат от сериозната научна репутация на кандидата той е редактор към списанието Journal of Crystallography (Hindawi Publishing Corporation) и е канен като рецензент от следните научни списания: Bulgarian Chemical Communications (над 10 пъти за периода 2010-2015, не са приложени копия от писмата), Physica B (3 пъти), Materials Chemistry and Physics (2 пъти) и Journal of Nanotechnology. Участвал е в две научни комисии по процедура по ЗРАСРБ и е бил рецензент за Румънската Изпълнителна агенция за финансиране на висшето образование, науката, развитието и иновациите за научни проекти в 4 научни конкурса за периода 2012-2013. Общият брой на рецензираните проекти не е посочен. Участвал е в организационния комитет на изключително успешната серия Национални кристалографски симпозиуми (от I до V) и на две научни школи.

Много сериозно е застъпена и педагогическата дейност. Д-р Шивачев е научен ръководител на двама редовни докторанти (Венцислав Дюлгеров, зачислен на 01.10.2011г., с предстояща защита на 30.09.2015г., и Христина Сбиркова, зачислена на 01.01.2012г.). В базата данни на Центъра за Обучение – БАН фигурира курс „Рентгеноструктурен анализ“ с лектори доц. д-р Росица Николова и доц. д-р Борис Шивачев, но в документацията по конкурса липсва информация за броя на обучените курсисти. Кандидатът е представил и доказателства за изнесени лекции по време на Международното лятно училище към Центъра за приложна спектроскопия (2013, ИОХЦФ-БАН) и Международното училище по фундаментална кристалография (2013, Гюлечица).

Отражение на научните публикации на кандидата в българската и чуждестранната литература:

Д-р Шивачев демонстрира солидни научни резултати. Общият брой на научните му публикации е 92, от които 88 – в списания с импакт-фактор. От тях 56 (съответно 53 с импакт-фактор) са публикувани след хабилизацията му през 2009г. Налице са и две публикации, издадени от Съвместния научен център на ЕК, които могат да се приемат за

глави от книги, тъй като съответните сборници притежават ISSN номера. В рамките на настоящия конкурс той участва с 43 научни публикации (от които 40 – в списания с импакт-фактор), на които ще се спра по-подробно. Тези 40 публикации са разпределени както следва: 1 – *JACS* (ИФ=9), 1 – *RSC Advances* (ИФ=3.7), 1 – *ChemPhysChem* (ИФ=3.36), 1 – *Dyes and Pigments* (ИФ=3.4), 1 – *Journal of Inorganic Biochemistry* (ИФ=3.2), 1 – *Microporous and Mesoporous Materials* (ИФ=3.2), 3 – *Tetrahedron: Asymmetry* (ИФ=3.2), 1 – *Journal of Organometallic Chemistry* (ИФ=2.3), 1 – *Journal of Photochemistry and Photobiology* (ИФ=2.291), 1 – *Polyhedron* (ИФ=2.0), 1 – *Journal of Crystal Growth* (ИФ=1.693), 2 – *Journal of Molecular Structure* (ИФ=1.599), 1 – *Diamond and Related Materials* (ИФ=1.57), 1 – *Comptes Rendus Chimie* (ИФ=1.483), 1 – *Heteroatom Chemistry* (ИФ=1.267), 3 – *Arkivoc* (ИФ=1.0), 1 – *Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Phenomena* (ИФ=0.827), 1 – *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering* (ИФ=0.82), 1 – *Journal of Chemical Crystallography* (ИФ=0.479), 1 – *Chinese Journal of Structural Chemistry* (ИФ=0.4), 3 – *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online* (ИФ ~ 0.3), 11 – *Bulgarian Chemical Communications* (ИФ ~ 0.3), 1 – *Доклади на БАН* (ИФ=0.12). Като обобщение – налице са 12 публикации в списания с импакт-фактор ≥ 2 , 9 – в списания с импакт-фактор между 1 и 2, и 19 – в списания с импакт-фактор под 1. Тази пропорция е приемлива, но съдейки по действителното научно съдържание на работите смятам, че авторите са могли да бъдат и по-амбициозни. Общият импакт-фактор е 58 (средно 1.35 на публикация в конкурса), което отново потвърждава значимостта на научните резултати. Сред 3-те публикации в списания без импакт-фактор са отбелязани 2 публикации в *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online* (добре известно списание, което преди две години загуби импакт-фактора си заради недалновидна редакторска политика), т.е. самите публикации са преминали през рецензиране. В една от публикациите (публ. 9) д-р Шивачев е единствен автор, а останалите са в съавторство (от 3 до 10 съавтори) със среден брой на съавторите 5.6. Това е разбираемо оглед на факта, че се дискутират органични структури, което изисква описание на синтетичните процедури и доказване на структурата посредством множество инструментални и/или теоретични методи. Следва да се отбележи, че сред съавторите липсват други специалисти по кристалографския анализ освен кандидата самостоятелно или съвместно с д-р Росица Николова, което показва без съмнение, че са налице приноси относно доказване на структурите в кристално състояние.

Цялостната научна дейност на доц. д-р Шивачев е намерила значителен отзвук в научната литература. Описани са 194 цитата на 45 научни публикации, много добро постижение с оглед на сравнително краткия период от време (от 2002 до 2015г). Цитатите са основно в чуждестранни научни списания и с много редки изключения – от чуждестранни автори. Осем публикации, а именно 4, 8, 21, 22, 24, 25, 27 и 29 (номерирани съгласно Приложение 9) са цитирани най-малко по 8 пъти, което отговаря на h-индекс 8. Най-често са цитирани работи 21 (*Scripta Materialia*, 2009, 24 пъти) и 25 (*JACS*, 2010, включена в конкурсната документация, 29 пъти), където кандидатът е съответно първи и втори автор. Както се вижда тези две работи са публикувани съответно през 2009 и 2010г. и динамиката на цитиране показва значимостта на научните резултати.

Основни научни и/или научно-приложни приноси:

Основна част от научната активност на доц. Шивачев е свързана с измерване, разшифровка и интерпретация на кристални структури на органични и органометални съединения. Това е видно от приложенияте по конкурса 43 публикации, като само в 6 (публ. 4, 9, 10, 11, 18 и 42) от тях липсва кристалографски структурен анализ. Налице са обаче нюанси по отношение на научните приноси. В една част от научните публикации е използван кристалографски анализ за потвърждаване и допълване на структурна информация, получена посредством други инструментални и/или теоретични методи за анализ. *Това може да бъде класифицирано като доказване с нови средства на вече съществуващи проблеми, теории и хипотези.* Въпреки, че в този случай кандидатът не е участвал в предварителния дизайн, синтез и кристализационни експерименти на изследваните молекули и комплекси, той има водеща роля по отношение на кристалографския анализ, който за всеки отделен случай е уникален. Фактът, че доц. Шивачев се е наложил като желан партньор за такъв тип изследвания сред основните синтетични групи от страната е показателен за качеството на неговата работа. Към тази група могат да бъдат включени публикации в сътрудничество с колеги от ИОХЦФ-БАН (публ. 1, 3, 7, 13, 16, 24, 26, 29, 32, 39), ФХФ-СУ (публ. 5, 23, 34, 35, 38, 41), ХТМУ (публ. 21, 22, 30, 43) и други (публ. 8, 14, 15, 25, 31, 33).

Кандидатът участва и активно в тематиките, които се разработват ИМК-БАН, а именно съкристализация на органични борни киселини с фармацевтично активни вещества с оглед подобряване свойствата на лекарствата по отношение на разтворимост и улеснен транспорт. Тук се включват публикации 2, 28 и 40. По тази тематика работи докт. В.Дюлгерев, под ръководството на кандидата. Следователно тук е изпълнен пълния цикъл на научно изследване – от идеята до реализацията, вкл. и рентгеноструктурен анализ. *Научните приноси тук могат да бъдат класифицирани като обосноваване и доказване на нова хипотеза.*

Друга тематика на ИМК, в която доц. Шивачев активно участва е получаването на синтетични и модифицирането на природни порести материали, както и тяхното приложение (публ. 12, 17, 36, 42), което може да бъде класифицирано като *получаване и доказване на нови факти.* По отношение на първите три публикации водещата роля на кандидата в кристалографския анализ е без съмнение, докато не мога да изразя ясно становище относно приносите в публикация 42.

Особено внимание искам да обърна на публикации 9, 18, 33 и 37. В публикация 9 (с единствен автор Б.Шивачев) е описана методология и софтуерна реализация на подход за получаване на координатите на водородни атоми от молекули разтворител при наличие на подходящи водородни връзки и/или други слаби междумолекулни взаимодействия. Определянето на положението на Н-атоми в кристалните структури е съществен проблем, който все още търси решение и тази работа е важна крачка напред по отношение на *създаването на нови методи за анализ* на кристалографски данни. В публикация 18 е

описана една евтина и лесна за ползване алтернатива на скъпоструващите комерсиални приставки при прахови рентгенови дифрактометри. Става дума за високотемпературен държател, работещ в интервала от стайна температура до 900°C, което е един съществен *научно-приложен принос* на кандидата. Научният принос в публикация 37 (JACS) е свързан с експерименталното заснемане (чрез използване на синхотронна радиация) и следваща разшифровка на структурата на синтетичен аналог на ДНК. Наличието на малък брой такива структури в протеиновата база данни, показва, че това не е рутинен проблем. В публикация 33 е описано разработването на нанокристални гелове с потенциална биологична приложимост като част от голям международен проект. Трудно ми е обаче, в този случай да оценя собствените приноси на кандидата.

По отношение на научните приноси трябва да бъде направено едно важно уточнение. В 33 от 43-те публикации по конкурса присъства като съавтор доц. д-р Росица Николова от ИМК-БАН, която също е експерт в кристалографския анализ. Основно това са публикации от първата група – анализ на органични и органометални съединения, осигурени от синтетични групи от страната. Това налага ясно да бъдат разграничени съответните научни приноси, при което ще използвам както наличните данни от публикациите, така и собствените си впечатления от работата с тандема Р.Николова/Б.Шивачев. Налице е едно особено ползотворно сътрудничество между двамата, при което в зависимост от тематиката на работата единият е водещ по отношение на обработката на експерименталните данни, докато другият осигурява прецизиране на експеримента и фокусиране на научните изследвания. Тези две компоненти са абсолютно необходими за високото качество на кристалографските изследвания и по никакъв начин не намаляват значението на индивидуалните им научни приноси по отношение на кристалографския анализ.

Критични бележки:

Имайки предвид значителния обем на приложената документация, намирам, че грешките и неточностите са в рамките на допустимото. Изброявам някои от тях: Приложение 7: В публикация 25 имената на авторите са описани по начин, различен от този в останалите публикации; В публикация 42 липсва името на списанието и е объркана годината на публикуване. Самата публикация 42 хронологично не би следвало да има такъв номер. Публикация 21 е представена като коректури. След като е излязла от печат през 2012г. би следвало авторите да са успели да си осигурят копие от нея. Публикация 37 е представена като документ в който липсва текст, а са показани само фигурите и схемите. В автобиографията на кандидата (европейски формуляр) публикация 28 по някакви причини е представена и с цитираната в нея литература.

Заклучение:

На базата на приложената документация и на описаното по-горе мога убедено да твърдя, че в лицето на доц. д-р Борис Шивачев ИМК-БАН има оригинален, продуктивен и

авторитетен изследовател с много добър научен опит и признание. Като имам предвид значителните научни постижения на кандидата, актуалността и перспективността на резултатите от изследователската му дейност, убедено препоръчвам на Научното жури да приеме изцяло предоставените материали в конкурса, да ги оцени положително и да избере и предложи

доц. д-р Борис Любомиров Шивачев

за заемане на академичната длъжност „професор“ по професионално направление 4.4. Науки за земята, научната специалност „Минералогия и кристалография (Структурна кристалография на органични и биологични вещества)“.

София, 16.06.2015г.

Подпис:



проф. дхн Л.Антонов