

РЕЦЕНЗИЯ

Относно: конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки (Структурен анализ и физикохимична характеристика на малки органични молекули), за нуждите на направление „Структурна кристалография и материалознание“ в ИМК-БАН.

Рецензент: проф. д-р Огнян Иванов Петров, СУ Св. Климент Охридски, Факултет по химия и фармация, член на научното жури назначено със Заповед № 26 РД-09/10.01.2024 г. на Директора на ИМК-БАН.

1. Участници в конкурса и допустимост на кандидатите

В конкурса за заемане на академичната длъжност „доцент“ в професионално направление 4.2. Химически науки, обявен в Държавен вестник бр. 95/14.11.2023 г., участва един кандидат - главен асистент д-р Руси Иванов Русев от Институт по минералогия и кристалография „Акад. Ив. Костов“ (ИМК) – БАН.

На основание чл. 56 от Правилника за прилагане на Закона за развитието на академичния състав в Република България е назначена Комисия, която да разгледа документите и състави протокол за допускането или недопускането на кандидатите в конкурса. В законоустановения срок Комисията по документите е взела решение за допускане до участие в конкурса на единствения кандидат гл.ас. д-р Руси Русев. Първото заседание на Научното жури е проведено на 25.01.2024 г. Избран е Председател на Научното жури и са утвърдени двама рецензенти. Научното жури прие единодушно, че предоставената от кандидата гл.ас. д-р Руси Иванов Русев научна продукция за участие в конкурса съответства на минималните национални изисквания и на изискванията на Институт по минералогия и кристалография „Акад. Ив. Костов“ (ИМК) – БАН.

Гл. ас. д-р Руси Русев е предоставил всички изискуеми документи за заемане на академичната длъжност „доцент“ в съответствие със Закона за развитието на академичния състав в Република България и с Правилника за неговото приложение, както и с ППЗРАС на ИМК-БАН. Кандидатът има призната образователна и научна степен „доктор“ на основание Диплома No 001392 от 15.09.2021 г., издадена от ИМК-БАН. Публикациите за конкурса, които представя кандидата, не се дублират с тези за придобиване на ОНС „доктор“ и няма данни за установено плагиатство.

2. Кратки биографични данни и кариерен профил на кандидата

Гл. ас. д-р Руси Иванов Русев е роден 1993 г в гр. Русе. Той придобива образователно-квалификационна степен „бакалавър“ през 2016 г, а след това и “магистър“ по специалност „Фин органичен синтез“ с отличен успех (Диплома № 002746/23.10.2017 г, издадена от ХТМУ София).

От 2014 до 2020 г Руси Русев работи като химик в Институт по минералогия и кристалография – „Акад. Иван Костов“ – БАН. По късно, в периода януари 2018 – юли 2021 г е редовен докторант в същия институт. През 2021 г защитава дисертационен труд на тема „Синтез, структурна характеристика и антимикробна активност на кватернерни амониеви съединения“ с научен ръководител проф. Б. Шивачев. От 2021 г до сега заема последователно академичните длъжности „асистент“ и „главен асистент“ в ИМК-БАН и има трудов стаж от 3 години по специалността.

3. Оценка на научните приноси на кандидата

Оценяването на кандидата е извършено в съответствие с изискванията на Закона за развитието на академичния състав в Република България, Правилника за прилагане на Закона и Правилник за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИМК-БАН

Кандидатът е приложил справка за изпълнение на минималните национални изисквания от ЗРАСРБ, както и на ППЗРАС (в сила от 21.10.2021 г.) на Института по минералогия и кристалография, БАН

Обобщена справка за постигнати и минимални изисквани точки по групи показатели.

Група от показатели	Съдържание	Доктор		Доцент	
		Минимални	Постигнати	Минимални	Постигнати
А	Показател 1	50	50	50	50
Б	Показател 2	–	–	–	–
В	Показател 3 или 4	–	–	100	100
Г	Сума от показателите от 5 до 10	30	34.66	220	273
Д	Показател 11	–	–	60	132
Сума		80	84.66	400	555

Анализът на данните от справката показва, че гл.ас. д-р Р. Русев покрива националните изисквания и критерии на Института по минералогия и кристалография - БАН за заемане на АД „доцент“ в професионално направление 4.2. Химически науки. Дори по показатели Г и Д тези критерии са надвишени.

За участие в конкурса д-р Русев е представил 21 публикации, разпределени както следва: 4 публикации с Q1 (100 точки) покриващи показател В и 17 публикации по показател Г. От тези 17 публикации 3 са с Q1, 5 са с Q2, 4 са с Q4 и 5 са в издания със SJR в Scopus, но без IF. Така разпределени, общият брой точки по показател Г е 273 точки, които надхвърлят минимално изискуемите. Наукометричната справка показва, че 15 от статиите са в международни списания, което прави 71%, а останалите 6 са в национални списания. В една от публикациите Р. Русев е първи автор, в 9 е втори автор, а в останалите 11 е на по задна позиция.

Изготвената от гл.ас. д-р Русев справка за броя на забелязаните цитати върху 7 от публикациите с негово участие, показва 66 цитирания. Това означава, че по показател Д кандидатът има 132 точки, а не както е написано в неговата справка 112 точки. Хирш индексът (h) на Русев, според Scopus е 4.

Научните резултати от изследванията на д-р Русев са популяризирани чрез участия в 2 международни и 4 национални научни форуми с 1 доклад и 5 постера. Активно участва и в 6 национални проекти, финансирани от ФНИ, като на един от тях е ръководител.

Публикациите по конкурса могат да се считат за интердисциплинарни. Основният принос на д-р Русев е установяване структурата на органични съединения с помощта на рентгеноструктурен анализ и няма участие в биологичните изследвания и синтезите, описани в публикациите, освен конкретно упоменатите.

Всички публикации са свързани с темата на конкурса „Структурен анализ и физикохимична характеристика на малки органични молекули“ и могат да бъдат разделени в две тематични области, както следва.

1) Структурен анализ и физикохимична характеристика на органични молекули с оглед на приложение в медицинската химия (публикации с № В4.1, В4.4, Г7.5, Г7.6, Г7.7, Г7.10 и Г7.16)

Проведени са структурни изследвания на серия синтетични аналози на природния цис-стилбен *Combretastatin* А-4 като потенциални противоракови вещества. Рентгеноструктурно е установено, че изследваните вещества кристализират предимно в орторомбична, моноклинна и триклинна кристални системи. В допълнение, детайлния кристалографски анализ установява, че техните кристалните структури се стабилизират от комбинация от слаби междумолекулни водородни взаимодействия и близки контакти от С-Н_{ароматен}...О=С, С(π-π-stacking) между съседните спрегнати системи. Осъществен е молекулен докинг на база на който, чрез структурни данни и математически изчисления може да се определи вида на лиганд-белтъчните взаимодействия. Като белтъчна мишена е избран тубулин-статминов комплекс, а като място на свързване в белтъка е избран колхицин-активния джоб. От проведените изследвания е установено, че най-активните съединения взаимодействат с Cys241 или с Cys241 и Lys352 в белтъчния комплекс, в сравнение с взаимодействията на колхицина с Cys241 и Val181 (№ В4.1, В4.4).

Разработката на нови производни на Тиофлавин Т е свързано с търсене на по-специфични маркери за ранна диагностика на болест на Алцхаймер. Уточнена е кристалната структура на тетрадекамерната олигонуклеотидна последователност на късоверижна ДНК - $d(\text{CCGGGGTACCCCGG})_2$, в чист вид, както и в присъствието на синтетичен хомолог на известното флуоресцентно вещество Тиофлавин Т (Г7.5).

Публикации Г7.6 и Г7.7 отразяват синтеза и структурния анализ на амантадин и римантидин, като потенциални биологично-активни вещества. Изследвано е тяхното антипаркинсоново и противовирусно действие. В резултат от рентгеноструктурния анализ е потвърдена структурата на новите съединения и е проведен молекулен докинг.

В публикация Г7.10 е докладвана нова полиморфна модификация на бизакодил - лекарство използвано широко като лаксатив, а публикация Г7.16. е свързана с получаването на казеиноподобни наночастици, които да се използват като потенциални носители на моделната молекула – толфенамова киселина. Основните приноси на гл.ас.д-р Русев се изразяват в изследване на термичното поведение на ненатоварени и натоварени с толфенамова киселина казеиноподобни наночастици чрез диференциална сканираща калориметрия.

2) Фундаментални научни изследвания съдържащи подробен структурен анализ и физикохимична характеристика (публикации с № В4.2, В4.3, Г7.1 до Г7.4, Г7.8, Г7.9, Г7.11 до Г7.15 и Г7.17).

Публикации В4.2 и В4.3 са свързани със синтеза и структурно охарактеризиране на азометинови производни на 3-аминохидантоин. Рентгеноструктурният анализ показва, че всички получени съединения кристализират в стабилната *транс* (E) форма. В допълнение, наличието на карбонилна (-C=O) и азометинова (-CH=N-) групи в изследваните съединения обуславя наличието на мрежа от вътрешномолекулни водородни взаимодействия. Въпреки, че споменатите две публикации са публикувани в реномирани международни списания и са минали независимо оценяване, считам за неправилно съединенията да се наричат Шифови бази. Въпросните съединения са азометинови производни не на амини, а на хидразиди с алдехиди, следователно по-правилно е да се нарекат хидразони.

Публикация Г7.1 разглежда синтеза на серия нови 4-ацилпиразолони съдържащи циклични амини в ациловия фрагмент. Чрез рентгеноструктурен анализ е установено, че в твърдо състояние, продуктите съществуват под формата на вътрешно и междумолекулни цвистерйони.

Титаносиликати и зеолити включени в публикации Г7.2 и Г7.3 са охарактеризирани чрез комбинация от електронна микроскопия, прахов рентгенофазов анализ, инфрачервена спектроскопия, а химичния им състав е установен чрез рентгенофлуоресцентен анализ. Дискутира се получаването и физикохимичните характеристики на титаносиликати и тяхното модифициране. Изследвана е възможността те да се използват за пречистване на замърсени води.

Публикации Г7.4, Г7.8 и Г7.17 имат чисто синтетичен характер и се отнасят до дизайна на полидентатни N,O-лиганди. Изучена е координационната им способност и възможност за приложението им като катализатори в моделна реакция за енантиселективно присъединяване на диетилицинк към алдехиди. На база рентгеноструктурния анализ са направени заключения относно ролята на различните заместители и функционални групи в изследваните молекули.

Синтезирани са съединения от класа на кумарините (Г7.13), пиримидините (Г7.14) и ацилпиразолоните (Г7.15) и подробно са определени физикохимичните им характеристики. Комбинацията от ЯМР и рентгеноструктурен анализ установи, че перимидиновото производно формира 1:1 солват с молекула метанол, който е стабилен и в разтвор и в твърдо състояние. Докладвани са два конформационни полиморфа на (3-ацетамидофенил) борната киселина. След решение на кристалните им структури се установи, че двата полиморфа притежават различен модел на водородни взаимодействия. Изследвани са кристалните структури на пет магнезиеви комплекса. В уводната част на публикация Г13 забелязах множество грешни структури. Такива са структурите на flavopiridol (alvocidib), warfarin и cefazolin. Случва се понякога да има грешки, но грешки на половината от молекулите, подсказва за известна немарливост на авторите.

Публикация Г7.12 описва монокристали на естествен хабазит, които са напълно заменени с амониеви катиони. Последващата йонна замяна на амониевия хабазит ($\text{NH}_4\text{-CHA}$) с 1M разтвори на ZnCl_2 и NiCl_2 води до образуването на цинкови и никелови форми. Замяната на NH_4^+ с Zn^{2+} и Ni^{2+} не е пълна, както е установено чрез FTIR.

В обобщение, оригиналните научни приноси на гл.ас. д-р Руси Русев са свързани с извършването на физикохимично охарактеризиране на вещества, чрез използването на прахов и монокристален структурен анализ, термични изследвания и спектроскопски методи. Решени, уточнени и описани детайлно са повече от 50 нови кристални структури което дава възможност да се направят достоверни изводи за връзката кристална структура-свойства на изследваните материали. Всички структури са депозиранни в международната база данни за органични кристални вещества – Cambridge structural database (CSD).

4. Критични бележки и препоръки

Нямам критични бележки към материалите по конкурса и към проведените изследвания, които са публикувани в реферирани специализирани списания.

Имам обаче някои препоръки. Добре е да се обърне малко повече внимание върху терминологията и номенклатурата. Освен, споменатите по-горе места, изрази като „катехол-ометилтрансфераза“ вместо „катехол-*O*-метилтрансфераза“ или “диетил цинк” вместо “диетилцинк” са досадни грешки. Бих препоръчал на д-р Русев за в бъдеще да се фокусира върху по-конкретна тематика. Запознавайки се подробно с представените публикации по конкурса оставам с неприятното впечатление, че участието му до известна степен е свързано с извършване на помощна или техническа работа, за което съм убеден, че не е така.

5. Заключение

Представените за конкурса научни трудове на гл. ас. д-р Руси Русев показват, че наукометричните му показатели надвишават изискванията за заемане на академичната длъжност „доцент“, съгласно ЗРАСРБ, Правилника за неговото прилагане и на Правилник за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в Институт по минералогия и кристалография „Акад. Иван Костов“ – БАН. Направеният анализ на представените за участие в конкурса материали ми дават пълното основание да изкажа своята положителна оценка за работата на гл. ас. д-р Руси Иванов Русев и да препоръчам на научното жури да подкрепи избора му за академичната длъжност „доцент“ по професионално направление 4.2. Химически науки (Структурен анализ и физикохимична характеристика на малки органични молекули) за нуждите на направление „Структурна кристалография и материалознание“ в ИМК-БАН.

20.03.2024 г
гр. София

Рецензент:
(проф. д-р О. Петров)