

## **ЮБИЛЕЙ: ПРОФ. ДХН БОРИС ГЪЛЪБОВ** **JUBILEE: PROF. DR. BORIS GALABOV**

**Б. В. Тошев**

*Българско дружество за химическо образование  
и история и философия на химията*

Авторитетното международно списание в областта на химическите науки *Journal of Molecular Structure* (Elsevier) посвети своя 1009 том на проф. дхн Борис Гълъбов от Факултета по химия и фармация на Софийския университет „Св. Климент Охридски“ по случай неговата 70-та годишнина и в признание на научните му приноси и заслугите му в развитието на световната теоретична химия. Американският учен проф. Хенри Ф. Шейфър от Университета на Джорджия представи в този том научната биография на проф. Б. Гълъбов.

Главният редактор на „Природните науки в образованието“ (*Chemistry: Bulgarian Journal of Science Education*), проф. дхн Борислав Тошев, разговаря с юбиляра.



**Борислав Тошев (БТ):** Несъмнено посвещаването на един том на престижно научно списание на юбилея на един учен е забележително събитие. *Journal of Molecular Structure* посвещава една от своите книжки на Вашите научни пости-

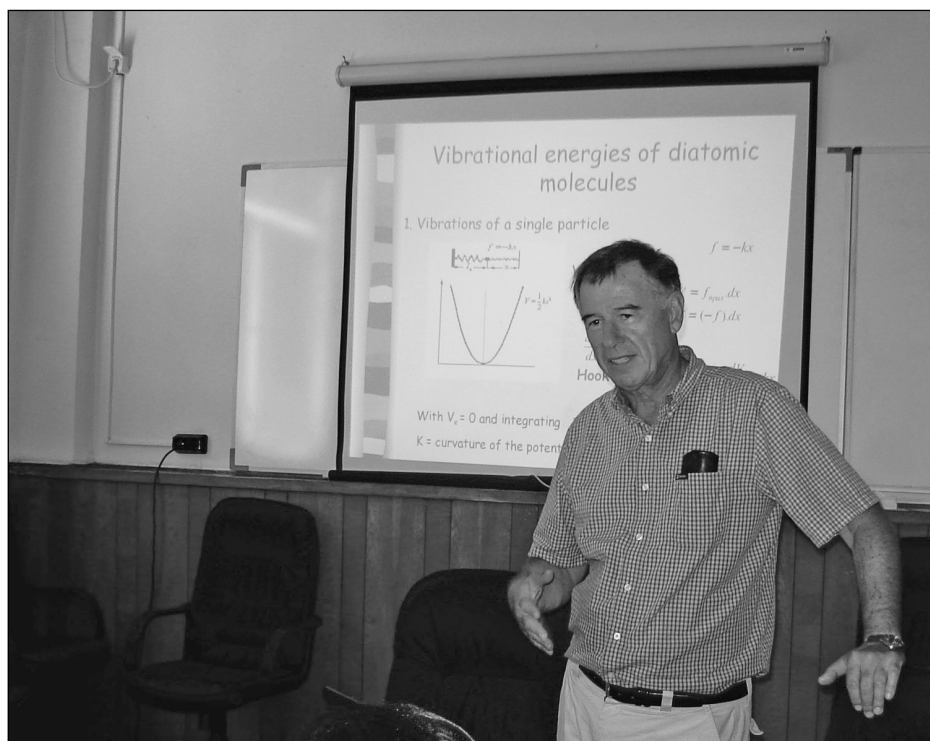
жения в областта на молекулната спектроскопия, където научната Ви биография е представена от проф. Хенри Шейфър. Кой е проф. Шейфър?



С Paul Schleyer и Henry Schaefer в Центъра по изчислителна химия, Университета на Джорджия, 2008 г.

**Борис Гълъбов (БГ):** Признателен съм на колегите проф. Henry F. Schaefer III и проф. Austin J. Barnes, под чиято редакция беше издаден тома на *Journal of Molecular Structure* (том 1009, 2012 г.), посветен на годишнината ми. Проф. Хенри Шейфър е и автор на научната ми биография, публикувана в списанието. Проф. Шейфър е един от пионерите на точните (*ab initio*) методи в квантовата химия. Световно известен учен, многократно номиниран за Нобелова награда, директор на Центъра по изчислителна квантова химия към Университета на Джорджия, САЩ. Автор е на редица основни теоретични разработки, в резултат на които квантовата химия се превърна в незаменим инструмент на съвременните химически изследвания. Ценни негови приноси в химията са и разнообразните приложения на теоретични методи за решаване на ключови химически проблеми, включително и за отхвърляне на заключения, базиращи се на некоректни интерпретации на експериментални данни. Ръководи голям научен колектив, ползващ се с изключително висока репутация. Хенри Шейфър е автор на над 1300 статии

във водещи научни списания., цитирани многократно в специализирана литература (h-индекс 107). Автор е на редица книги. За целия период 1980 -2000 г. той е шестият най-често цитиран учен измежду 628 000 химици, чиито трудове са отразени в Science Citation Index. Между нашата Лаборатория по компютърна химия и спектроскопия към Химическия факултет на Софийския университет и Центъра по изчислителна квантова химия на Университета на Джорджия се развива извънредно ползотворно сътрудничество.



Лекция пред Международното лятно училище по спектроскопия, София, 2010 г.

**БТ:** Научното творчество носи неопишуема радост и щастие на тези, които се занимават с научна дейност. Всеки нов резултат изглежда скъп и неповторим за този, който го получил. Все пак в разнообразието на нови научни резултати, получени от Вас и Вашите сътрудници, дали има такива, които цените особено много. Има ли индикация в световната литература, че тези Ваши оценки и предпочитания се споделят и от други учени?

**БГ:** В продължение на 25 години (1972 – 1996 г.) нашите изследвания бяха съсредоточени главно върху проблеми от областта на вибрационната спектроскопия, по-специално развиването на теоретични подходи за интерпретация на интензивностите в инфрачервените (ИЧ) и рамановите молекулни спектри. През 1981 година в *Journal of Chemical Physics* беше публикувана моя работа върху параметричен модел за анализ на ИЧ интензивности. През 1993 година съвместно с Тодор Дудев и Соня Илиева публикувахме в *Spectrochimica Acta A* статия, представяща нов подход за коректна интерпретация на диполните производни спрямо атомните декартови координати, т. н. атомни полярни тензори, които се определят от ИЧ интензивности. Редакцията на *Spectrochimica Acta A* номинира тази работа за наградата Харолд Томпсън, присъждана за най-добра научна статия в списанието през 1993 година. Кулминация на тези проучвания беше публикуването съвместно с Тодор Дудев на монографията *Vibrational Intensities* (Elsevier) през 1996 година. Признание за постиженията ни в тази област са поканите за над 10 пленарни и секционни доклада пред международни научни форуми (три поканени доклада пред XV (Норич, 1981), XVIII (Амстердам, 1987), и XXII (Будапеща, 1995) Европейски конгреси по молекулна спектроскопия, както и доклад пред IX Международен конгрес по квантова химия (Атланта, 1997).

През периода 1997 - 2012 година научната дейност на групата бе значително пренасочена към областта на изчислителната химия и физичната органична химия, макар и досега да провеждаме спектроскопски експерименти. Най-важните ни резултати от този период накратко са: (i) Предложен бе нов индекс на реактивоспособност за органични молекули – *атомен електростатичен потенциал* – и показана забележителната точност, с която тази теоретична величина предсказва реакционната способност при серия органични реакции, както и при междумолекулни взаимодействия (*Journal of Physical Chemistry A*, 1998, 1999, 2002; *Journal of Organic Chemistry*, 2006); (ii) Доказан бе произходът на т. н. „бензилен ефект” при  $S_N2$  реакции (*Journal of the American Chemical Society*, 2008); (iii) През 2009 година публикувахме в *Journal of the American Chemical Society* статия, в която бе описан нов индекс на реактивоспособност за приложение при една от най-важните реакции в органичната химия – електрофилно ароматно заместване. Величината *електрофилен афинитет*, определяна чрез теоретични пресмятания, предсказва надеждно реакционната способност при тези процеси; (iv) Изяснени бяха в детайли механизмите на няколко солволитични реакции: аминолиза на естери, аминолиза на карбамати, хидролиза на амиди. Тези реакции са особено важни както за химията, така и за биохимията; (v) Особен интерес, надявам се, представляват последните ни проучвания върху механизмите на реакции на електрофилно ароматно заместване. При проучвания върху халогениране и сулфониране на ароматни системи в неполярна среда показахме, че



Някои от сътрудниците на проф. Гълъбов в София

класическият  $S_EA_r$  механизъм, включващ формирането на арениев йон ( $\sigma$ -комплекс) в скоростопределящия етап, не е универсално валиден, въпреки неговото всеобщо приемане от химическата научна общост. Напротив, при реакции на халогениране с молекулен  $Cl_2$  и  $Br_2$  се конкурират два процеса: (1) присъединяване на  $X_2$  и формиране на адукти, последвано от елиминиране на  $HX$  и водещо до крайните продукти на заместване; (2) протичане на процеса през едностадийен съгласуван механизъм, без междинно формиране на  $\sigma$ -комплекс. Сулфонирането с  $SO_3$  в неполярна среда също протича по съгласуван едностадийен механизъм с участието на две молекули  $SO_3$ . В полярна среда реакцията протича по класически  $S_EA_r$  механизъм с междинното формиране на  $\sigma$ -комплекс, но отново с участието на две молекули  $SO_3$ . Двете статии върху тези проучвания са публикувани в *Angewandte Chemie International Edition*, 2011) и *Journal of the American Chemical Society*, 2011.

Горните разработки намериха значителен отзвук в литературата. Редица лаборатории използват атомния електростатичен потенциал за охарактеризиране на реакционната способност на молекулите. Пред последните 6-7 години имаме над 700 цитирания в литературата върху работите ни в областта на физичната органична химия.

Като имам предвид втората част на Вашия въпрос ми се налага да отбележа някои факти. Признание за постигнатите от нашата лаборатория научни резултати са изнесените общо над 70 поканени доклади пред международни научни форуми и в чуждестранни университети. Трудовете ни са цитирани над 1100 пъти в спе-



Ректорът проф. Иван Илчев връчва Голямата награда за наука на СУ, 2008

циализираната литература, почти изцяло от чуждестранни автори. Член съм на рядколегиите на три международни научни списания: *Journal of Molecular Structure*, *Asian Journal of Spectroscopy* и *Open Spectroscopy Journal*. Получих наскоро Почетна грамота от *American Chemical Society* за приноса ми като рецензент на статии, представени за публикуване в списания на *American Chemical Society*. Ръководен от мен научен колектив стана първия носител на Голямата награда за наука на Софийския университет, учредена през 2008 г. През 2009 г. бях избран за член-кореспондент на Европейската академия за наука, изкуства и литература (Париж). Специалният том на *Journal of Molecular Structure*, посветен на моята годишнина, също така е едно международно признание за нашата изследователска работа. Тук искам да подчертая безценния принос на членовете на нашата лаборатория проф. Соня Илиева, доц. Тодор Дудев, гл. ас. Валя Николова, гл. ас. Диана Чешмеджиева, докторантите Петя Бобадова и Гергана Колева за постигането на тези резултати.

**БТ:** Теоретична химия, квантова химия, изчислителна химия, компютърна химия – това са нови области на химията, в които химическата информация се получава с пресмятания и е кодирана с числа. Това не е обичайната представа на широката публика за химия. Можете ли да представите работни определения, чрез които да се внесе разграничаване на посочените по-горе научни области?

**БГ:** Има доста голямо припокриване в предмета на тези научни области, но и някои съществени различия. Теоретичната химия обхваща всички споменати от



Съученици от гимназията

Вас области. В литературата при опити за дефиниране на областта на теоретичната химия се отбелязват квантова химия, изчислителна химия, молекулно моделиране, молекулна динамика, молекулна механика, математическа химия, теоретична химична кинетика. В по-широк смисъл към теоретичната химия се отнасят и някои области на класическата физикохимия като напр. статистическата термодинамика.

Най-важните направления на изчислителната химия са квантовата химия, молекулната динамика и молекулната механика. Компютърната химия в значителна степен се припокрива с изчислителната химия, но включва и молекулно моделиране (например QSAR), както и хемоинформатиката.

**БТ:** Как и кога възникнаха интересите Ви към химията?

**БГ:** Към химията се ориентирах още в последните класове в гимназията. Желаех да започна научна кариера в природните науки, като се колебаех между химия и физика. Според тогавашните ми представи да се работи химия в български научен институт беше по-достъпно в сравнение с физиката, където изискванията за скъпа апаратура са по-сериозни. По време на следването обикнах много химията и това се дължеше на прекрасните ни преподаватели от онези години – акад. Георги Близнаков (Обща и неорганична химия), акад. Ростислав Каишев (Физикохимия), проф. Христо Иванов (Органична химия), проф. Никола Пенчев (Аналитична химия), проф. Александър Раев (Физика), проф. Дойчин Дойчинов (Математика) и



На риболов в Америка

редица други. Химията е една от великите науки – както е добре известно Нобелови награди се присъждат за постижения само в няколко науки, за които се счита, че допринасят най-съществено за прогреса на човечеството. Химията е една от тях.

**БТ:** Вашата активна гражданска позиция за процесите, които се развиват в българското общество, е добре известна. Имате и богат управленски опит като заместник-ректор на Софийския университет и заместник-министър в Министерството на образованието и науката. Как гледате на процесите, които текат в последните години в българското средно и висше образование?

**БГ:** За съжаление процесите в българското училище будят повече тревога, отколкото оптимизъм. Изключение са наши сегашни студенти-химици, които владеят добре българския език и граматика. Преди години, повечето завършващи ученици бяха добре подготвени в това отношение. Разбира се, най-добрите възпитаници на нашите училища и сега имат отлични качества. Постигането на добри резултати от преобладаващата част от учениците изглежда е сериозен проблем. Все пак мисля, че с развитието на демократичното общество и на икономиката в България подготовката на нашите ученици ще се подобри значително през следващите години. Едно от условията за това е да се повиши съществено социалният статус на българските учители. Това ще им разкрие възможности да се посветят в по-голяма степен на своето професионално израстване и на работата си с учениците. Надявам се поли-

тиците да осъзнаят, че без добре обучени, квалифицирани млади хора, завършващи средните училища и университетите, напредъкът на България е немислим. Засега обаче картината в това отношение е нерадостна. Между другото, да се даде приоритет на образованието беше и първия съвет на Бил Гейтс за успешно развитие на страната ни, отправен при наскорошната му среща с българския президент.

**БТ:** Господин професор, имате ли интереси и любими занимания във от полето на химията и науката?

**БГ:** В младежките години се занимавах доста с музика. Имам няколко песни, изпълнени от Лили Иванова и Богдана Карадочева.

Преди години играех тенис, но напоследък съм позабравил уменията си. Убедих се в това при последния си престой в Университета на Джорджия през тази година. Но пък редовно ходя на риболов – река Струма е любим излетен обект, а също и морето. Заедно с моят колега и приятел доц. Николай Гаджев рядко пропускаме почивните дни за тези приятни и разтоварващи занимания.



Семейството: съпруга Данка и внуците Васко и София (2011 г.)

✉ **Prof. B.V. Toshev**

University of Sofia

1 James Bourchier Blvd.,

1164 Sofia, BULGARIA

E-mail: [toshev@chem.uni-sofia.bg](mailto:toshev@chem.uni-sofia.bg)