

## РЕЦЕНЗИЯ

от

проф.дхн Мариана Йонова Митева, кат. Аналитична химия, ХФ на СУ  
“Св.Кл.Охридски”

член на научното жури за провеждане на конкурс за “Доцент” по  
Аналитична химия /шифър 01.05.04/, направление 4.2 Химически науки  
/Аналитична химия/  
/заповед РД-09-171/07.09.2011 в ИОХ ЦФ-БАН

В конкурса за “Доцент” по Аналитична химия към ИОХ ЦФ-БАН участва 1 кандидат **д-р ДАНИЕЛА ВАЛЕНТИНОВА АНТОНОВА** от Лабораторията по инструментална хроматография и масспектрометрия - ИОХ ЦФ-БАН.

Д-р Д.Антонова е завършила специалност “Химия” на Хим фак на СУ “Св.Кл.Охридски” през 1987 г. От 1987 г. започва научноизследователска работа отначало в Научно-изследователски и проектно-конструкторски институт за специални химикали, а след това последователно в Хим.фак на СУ /кат, Органична химия/, в ЛТУ /Централна лаборатория по инструментален анализ/, а от април 2000 г – в ИОХ ЦФ – БАН. Защитава дисертацията за образователната и научна степен “д-р” през 2010 г.

Кандидатът е представил за участие в конкурса следните научни публикации:

- 32 научни статии публикувани в наши и международни научни списания, от които 4 са включени в дисертационния труд /7,23,24,27/ и по тази причина няма да бъдат рецензирани.
- 1 автореферат
- 18 заглавия на постери на научни конференции
- 197 цитата на научните статии, от които 10 са на трудове включени в дисертацията
- 15 заглавия на научни проекти с нейно участие, финансирани както следва: 11 от НФНИ; 2 от БАН; 2 от фирми.

След изваждане на публикациите с които е защитила дисертацията за “доктор” остават:

- **28 научни статии /от които 22 в списания с IF/**
- **18 заглавия на постери представени на научни конференции**
- **197 цитата**
- **15 проекта**
- 

Научната дейност на д-р Д.Антонова е в областта на **аналитичната органична химия** /качествен и количествен анализ и структурно охарактеризиране на органични съединения/. Изследваните обекти са анализирани с **хроматографски и масспектрални методи – предимно с модерните техники на тези методи –GC, GC-MS, MS, ESI-MS и др..**

Според собствената оценка на кандидата /която аз приемам!/ изследванията ѝ са в **3** научни направления:

## **I. Охарактеризиране и количествен анализ на природни съединения в различни матрици – липиди, етерични масла, растителни проби. гъби, прополис и др.**

Основните резултати в това направление са представени в публ. **4, 8, 10-20, 28, 29, 31**. Анализите са проведени с метода на газовата хроматография с маспектрална детекция /GC-MS/.

В различни обекти от растителен и животински произход и **за първи път във Fungae /гъби/** /последните не принадлежат нито към растителните, нито към животинските видове/ са изследвани за съдържание мастни киселини. В различните обекти са идентифицирани и са определени количествено различни типове мастни киселини – наситени, ненаситени, с четен и нечетен брой C-атоми, с прави и с разклонени вериги, а в някои случаи и изомери. Доказано е, че изследваните 2 вида гъби съдържат различен брой мастни киселини, включително и с нечетен брой C-атоми с разклонени вериги и с 2 спрегнати двойни връзки. По мое мнение тези резултати представляват съществен научен принос, както и получените данни, че при GC-MS анализа на мастни киселини диметилкоксазолиновите производни са по-подходящи от съответните метилови естери главно поради по-информативната фрагментация и по-доброто хроматографско разделяне, което е важен методичен принос. Именно тези производни са използвани за първи път при GS-MS анализа на минорна фракция на краве масла с цел изследване на автентичността им, проблем на който напоследък се обръща особено внимание. Получена е нова и интересна информация за мастно-киселинния състав на ядливи гъби. Идентифицирани са нови мастни киселини и позиционно-измерни хексадецени киселини.

Нови и интересни резултати са получени и при анализа на етерични масла и други проби от растителен и животински произход. Сериозно аналитично постижение е едновременното определяне на голям брой индивидуални компоненти, включително и такива с ниски концентрации. Трябва дебело да се подчертае, че наред с **научните приноси**, има и такива с много **съществен научно-приложен** характер – най-яркият пример в това отношение е търсенето на връзка между състава на проба от определен растителен вид и географския ѝ произход чрез изпозването на подходяща хеометрична обработка на данните, както и определянето на метаболитни профили. В други случаи въз основа на получените експериментални данни, напр. някои от компонентите присъстващи в органите на винени сортове лози с фунгицидно действие са предложени като биомаркери за такова действие, както и др. подобни.

## **II. Изследване на тавтомерни системи - количествено определяне на състава на тавтомерни смеси, влияние на структурата и ефекта на обкръжението/**

В тази област е и дисертационният труд на кандидата /публ. 7, 23, 24, 27/. Останалите публикации, които са рецензирани са **22, 25, 26, 30, 32**.

Изследванията върху тавтомерните равновесия си остават **актуални** от десетилетия, но едва в последно време с приложението на маспектралните техники се повиши в значителна степен **надеждността на структурното**

**охарактеризиране, както и прага на количественото определяне** на компонентите. Именно по тази причина интересът към тези изследвания се засилва и те са много **актуални**. От друга страна, като се има предвид, че тези процеси намират все по-широко приложение в **сензориката и в конструкцията на молекулни устройства**, /процесите са много чувствителни към състава на реакционната среда /обкръжението // интересът към тях се диктува не само от **теоретични**, но и от **научно-приложни съображения**. В това научно направление основен метод за изследване е **маспектралният**.

Използването на MS методите за изследване на тавтомерни равновесия има това предимство, че в тези случаи процесите протичат в газова фаза и се избягва влиянието на обкръжението. Това позволява да се получат количествени данни за съдържанието на двата тавтомера и съответно да се определи тавтомерната константа. За едно от изследваните съединения за първи път е определена тази константа и е опровергано широко разпространената представа, че то съществува само като кето тавтомер. Тези резултати валидни за газова фаза са подвърдени и с друг независим метод – а именно с флаш-фотолиза.

Друг съществен научен принос представляват резултатите получени в резултат на изследванията върху здравината на вътрешно-молекулната водородна връзка при серия от азнафтоли, като се проследява фрагментацията им. От една страна е показано, че в газова фаза при азнафтолите връзката е слаба, докато при съответните Шифови бази, тя е здрава. Тези експериментални резултати са потвърдени със спектрални данни и квантовохимични изчисления. От друга страна натрупаната от авторите информация относно фрагментацията на азнафтолите в газова фаза е позволила да се потвърди контролираното тавтомерно превръщане при предложените от тях молекулни превключватели от нов тип, основаващи се на пренос на протон. Несъмнено това са **значими научни приноси, които имат и важно практическо приложение**.

Друго важно постижение представляват изследванията върху един новосинтезиран макроцикличен лиганд, съдържащ и азнафтол и съответно търпящ тавтомерни промени. В резултат на комплексообразуване с йони на алкани метали се реализира контролирано отместване на тавтомерното равновесие, което позволява използването му като молекулен превключвател. /Лигандът е селективен за литиеви йони/. С метода на ESI-MS са изследвани комплексообразователните процеси с цел разработване на методика за полуколичествена оценка на стабилитетните константи на комплексите. И в този случай резултатите са съпоставени с тези, получени чрез друг аналитичен метод /спектрофотометрично титруване/ като е получено добро съвпадение в стойностите на съответни стабилитетни константи.

### **III. Разработване на нови методи за обработка на спектрални данни и за анализ на нетривиални химични равновесия**

В това направление са включени публикации **1-3,5,22,26**. В тях е описан метод за количествен спектрален анализ на смеси от химични съединения /компоненти/, които не могат да бъдат изолирани като индивидуални съединения, а ивиците им в UV-Vis спектъра се припокриват. Чрез подходяща математическа

обработка се изчисляват спектрите на индивидуалните компоненти, респективно концентрациите им. Методът е много подходящ за изследване на равновесни процеси в разтвор и успешно е приложен за изследване на тавтомерни съединения в разтвор. С използването му за първи път са изследвани редица тавтомерни равновесия и е получена важна информация за ефекта на заместителите и влиянието на разтворителя върху равновесния процес. Тези изследвания също са с приносен характер.

Публикации **6, 9** и **21** са посветени на други проблеми, извън посочените 3 направления– съответно екологични, фотофизични и микробиологични. И те представляват определен научен интерес, публикувани са в специализирани научни списания и съдържат научни приноси.

Трябва дебело да се подчертае, че д-р Д.Антонова вече е напълно изграден учен в областта на аналитичната химия. Познава в детайли най-широко използваните хроматографски и масспектрални методи и умело ги прилага. Запознала се е и с методите за пробоподготовка на разнообразни по своя характер проби, което я прави компетентен и ерудиран химик-аналитик. От списъка на съавторите ѝ се вижда, че тя е работила успешно със специалисти от различни научни области. Противно на широко разпространеното мнение, че при по-голям брой съавтори се «размива» личния принос на отделните автори, аз съм убедена, че по-настоящем умението да се работи в големи екипи от учени специалисти в различни области е голямо предимство и постижение за всеки учен. Добрият учен-специалист може да намери място във всеки екип.

Както вече няколкократно бе посочено по-горе научните ѝ изследвания са актуални, в модерни научни направления, съдържат съществени научни приноси. Публикациите ѝ са в реномирани научни списания и са намерили широк отзвук в научната литература. Участва активно и **успешно** в разработката на научни проекти, участва редовно в научни конференции и други научни форуми. Проявява голяма активност и в **научно-приложната дейност** на института – разработва аналитични методики по заявка на външни организации, методики за анализ на хранителни продукти и др. подобни, както и в проекти с научно-приложен характер /с АЕЦ Козлодуй, с фирми – производители на розово масло и др./

Въпреки че, досега не е работила на преподавателска длъжност тя има и **преподавателска активност** – била е консултант на дипломанти и стажанти, обучила е 4 новопостъпили специалисти в Лабораторията по инструментална хроматография и масспектрометрия, консултира външни специалисти, както и сътрудници от ИОХ ЦФ. .

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Въз основа на всичко посочено по-горе считам че,

**гл.ас. д-р ДАНИЕЛА ВАЛЕНТИНОВА АНТОНОВА**

е изпълнила изцяло всички изисквания на Закона и допълнителните изисквания на ИОХ ЦФ – БАН за научното звание “**доцент**”, което ми дава пълно основание да гласувам “За” удостояването ѝ със званието “Доцент” и препоръчвам на НС на ИОХ ЦФ – БАН тя да бъде назначена на тази длъжност в Лабораторията по инструментална хроматография и маспектрометрия към Института.

12/10/2011

София

/проф.дхн М.Митева/