

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за **“Доцент”** по специалността **“Аналитична химия”** – 01.05.04, за нуждите на Лаборатория по инструментална хроматография и мас-спектрометрия, обявен в ДВ. Бр. 45/14.06.2011 год.

Рецензент: доц. д-р Христо Димитров Чанев, Химически факултет на СУ “Св. Кл. Охридски”

Единствен кандидат – д-р Даниела Валентинова Неделчева - Антонова

Г-жа Антонова е родена в гр. Търговище. Завършва средно образование, в родния си град, в математическата паралелка на ЕСПУ „Георги Димитров” през 1982. Същата година е приета за студент в Химически факултет на СУ “Св. Климент Охридски”. Завършва успешно през 1987 г. с образователна-квалификационна степен магистър по органична химия. Специализира в областта на високоефективната течна хроматография, през 1988 г., в Химически факултет на СУ.

За периода от 01.03.1990 г. до 30.09.1996 г. е редовен докторант към катедра Аналитична химия с ръководител доц. д-р Иванка Топалова. Защишава дисертация и придобива научната и образователна степен “доктор” през 2010 г.

Трудовият си стаж е натрупала както следва:

- От октомври 1987 г. до края на февруари 1990 г. работи като н.с. III ст. в Научно-изследователски и проектоконструкторски институт за специални химикали, Владая, гр. София;
- От 01.04.1998 г. до 05.01.2000 г. работи като химик в Лесотехнически университет, “Централна лаборатория по инструментален анализ”, бул. "Климент Охридски" № 10, гр.София;
- От 01.04.2000 г. е назначена като химик в “Лаборатория по инструментална хроматография и масспектрометрия”, на ИОХЦФ, БАН, ул. “Акад. Георги Бончев” бл.9, гр. София, където работи и до сега.

За участие в конкурса д-р Антонова е включила списък с 32 научни публикации - 31 излезли от печат, за които са представени отпечатани копия и една приета за печат в “Dyes and Pigments”, за която е приложена разпечатка на коректурата от редакцията на списанието. Отпадат за рецензиране, трудовете включени в дисертацията за получаване на образователната и научна степен “Доктор”. Това са публикациите от приложения списък с номера публикации: [7, 23, 24 и 27].

От представените за рецензия научни публикации **3** са публикувани в българско реферирано списание (*Comptes Rendus de L'Academie Bulgare des Sciences* – импакт фактор 0.219), а останалите **29** са публикувани в специализирани международни списания с импакт фактор.

Към документите за участие в конкурса е приложен списък с 15 постера с участие на д-р Антонова, представени на научни симпозиуми 11 от които проведени у нас и 4 в чужбина.

Приложен е списък на участия на д-р Антонова в научни проекти.

За годините на своето творческо развитие д-р Антонова последователно специализира в областта на хроматографията и маспектрометрия, като това естествено определя насоките на нейното развитие като изследовател. Анализът на представените за рецензия научни трудове показва, че изследователският интерес на кандидатката е насочен, от една страна, към прилагане на газовата и високоефективната течна хроматография за изучаване на свойствата и количествено охарактеризиране на широк набор от новосинтезирани органични съединения и природни продукти, а от друга страна е насочен към прилагането на маспектрометрията в структурни изследвания с различна насоченост към приложните и фундаментални изследвания.

Научните приноси на д-р Антонова могат да бъдат обособени в три направления:

- I) Количествено изучаване на равновесни тавтомерни смеси, в посока изучаване на структурни ефекти и ефекти на обкръжението и разработване на сензорни системи за анализ на метални йони и на молекулни устройства [22, 25, 26, 30, 32].

Това направление доразвива и дава нови моменти в изследванията обобщени и представени в дисертационния труд на кандидатката, за придобиване на образователната и научна степен “Доктор”.

Направена е количествена оценка на тавтомерното равновесие при азнафтоли в газова фаза. [22]. Наред с възможностите на NMR, UV-VIS, FL и IR методите за изследване в разтвор оригинално е приложена маспектрометрията, като метод за анализ на равновесието газова фаза. Достоверността на тези изследвания е потвърдена посредством сравнение с публикувани в литературата резултати от изследвания в разтвор проведени от други автори. Маспектрално е изследвана здравината на вътрешномолекулната водородна връзка при фенилдиазнафтолите. Установено е, че в газова фаза вътрешно молекулната водородна връзка при азнафтолите е слаба и тяхната фрагментация много наподобява фрагментацията

на 4-(фенилдиазенил)-нафтален-1-ол. При съответните Шифови бази, вътрешно молекулната водородна връзка е достатъчно здрава и да позволява единствено загуба на азометинов протон. Тези изводи са в съгласие с резултатите от спектрални измервания в разтвор и квантово-химични изчисления [22, 25].

В това направление попада и публикация [26]. Чрез маспектрометрия е изследван ефектът на модифициране на ароматната система при 4-(фенилдиазенил)-фенол, 4-(фенилдиазенил)-нафтален-1-ол и 4-(фенилдиазенил)-антрацен-1-ол върху тавтомерното равновесие в газова фаза. Показано е, че 4-(фенилдиазенил)-фенол съществува изключително под формата на енол, при 4-(фенилдиазенил)-нафтален-1-ол също преобладава енолната форма, а при 4-(фенилдиазенил)-антрацен-1-ол равновесието е слабо изместено към оксо изомера. За 4-(фенилдиазенил)-антрацен-1-ол получената стойност за константа на тавтомерно равновесие е първият количествен резултат публикуван в литературата, който опровергава широко разпространеното схващане, че това съединение съществува единствено като оксо изомер. Получените от вторите данни са потвърдени чрез флаш фотолизни измервания в бензен.

Обобщената информация по отношение фрагментацията на тавтомерните форми на азнафтоли в газова фаза позволи да бъде потвърдено контролираното тавтомерно превръщане при нов тип молекулни превключватели, базиран на тавтомерен пренос на протон [22, 30, 32]. Разработена е процедура, на основа използване *ESI-MS*, за бърза полуколичествена оценка на селективността на новосинтезирания тавтомерен лиганд 2-((1,4,7,10-тетраокса-13-азациклопентадекан-13-ил)метил)-4-(фенилдиазенил)нафтален-1-ол спрямо метални йони на алкалните елементи [30].

II) Разработване на нови методи за обработка на спектрални данни и за анализ на нетривиални химични равновесия [1, 2, 3, 5, 22, 26].

Разработен е метод за количествен спектрален анализ на смеси от компоненти, които не могат да бъдат експериментално разделени [1, 2]. Методът се базира на разделяне на припокриващи се ивици в абсорбционната спектроскопия и може да намери приложение при обработка на резултати от анализ с HPLC / UV-VIS, на трудни за разделяне двойки аналити.

Чрез този метод са анализирани за първи път в разтвор някои тавтомерни съединения (Шифови бази и протонирани моноазобагрила) и е получена важна информация за ефектите на заместителите и разтворителите върху тавтомерното равновесие [3, 5, 22, 26].

III) Охарактеризиране и количествен анализ на природни вещества в различни матрици чрез оптимизирани хроматографски и масспектрални техники.

В това направление могат да се обособят три насоки на развитие.

1. Анализ на липидния състав на проби от растителен, животински и гъбен произход

– в тази група попадат публикации с номера [8, 10, 12, 14].

Посредством газова хроматография (ГХ) и газова хроматография с масспектрална детекция (ГХ/МС) на метилови естери са изследвани различни природни обекти. Целта на изследванията е качествено и количествено определяне на мастно киселиния състав на масла изолирани от различни обекти [10, 14]. Например, установено е, че двата вида гъби се различават помежду си главно в състава на диеновата фракция. Шест мастни киселини са описани за пръв път при гъби.

За ГХ/МС анализ на мастни киселини се предлага прилагане на анализ на 4,4'-диметилноксазолиновите (DMOX), като по-подходящи от метиловите естери, тъй като те съдържат азотен атом, върху който се локализира зарядът при йонизацията в масспектрометъра. Така се намалява вероятността за миграция на двойните връзки във въглеродната верига, а също и еднозначно се откриват местата на разклоненията и местата на двойните връзки. ГХ/МС на DMOX-производни е приложена за анализ на минорната *цис,цис*-диенова (18:2) фракция от краве масла с цел определяне на тяхната автентичност. За първи път са установени и еднозначно идентифицирани изомерни бис-метилен-прекъснати октадекадиенови мастни киселини [8, 12].

2. Анализ на етерични масла – публикации с номера [11, 28].

Метода на ГХ/МС е приложен за качествено и количествено са определяне на 49 летливи компоненти (които представляват 93-99% от летливата ароматна фракция) в проби студено пресовано масло от лимон от различни страни-производители [28]. ГХ/МС е приложена за анализ на проби етерични масла от 3 диворастящи вида от род *Micromeria Bentham* (сем. *Lamiaceae*) от България и Македония [11]. Идентификацията на компонентите е направена на базата на техните масспектри и линейни индекси на задържане.

3. Анализ на екстракти и летливи компоненти на проби от растителен и животински произход – публикации с номера [15, 16, 18, 19, 20, 31].

Чрез ГХ/МС е анализирано съдържанието на алкалоиди [15] и алкохоли [20] в корени и надземни части от *Cicuta virosa L.* За пръв път във вида са описани 7 алкалоида, съответно 8 алкохола. Проведено е сравнително ГХ/МС изследване на летливата фракция от цветовете,

надземни части и корени от *Asphodeline lutea* [16]. Идентифицирани са 29 индивидуални съединения. Чрез ГХ/МС са анализирани хексанови екстракти на проби от диворастящ *Sideritis scardica Griesb.* (пирински чай) и негови култивирани хибриди [17]. Идентифицирани са над 50 индивидуални съединения.

С ГХ/МС е изледван химичният състав на листа от *Vitis vinifera L.* (европейска винена лоза) [18, 19]. Проведен е анализ на 17 проби прополис от Малта [31]. Всички проби показват типичен средиземноморски химичен профил, характеризиращ се с високо съдържание на дитерпени, захари и техни производни.

По публикуваните, представени за рецензия работи са забелязани 197 цитата – приложен е списък със забелязаните цитати към дата 01.07.2011 г. Направеният анализ, показва, че са забелязани цитати по 13 от представените 32 научни статии. Трите най-цитирани публикации – [3] - 69 цитата, [5] – 53 цитата и [2] 42 цитата дават 83.2 % от всички забелязани цитати. Обобщено по години:

- за периода 1996 – 2006 г. са публикувани 9 статии със забелязани 183 цитата;
- за периода 2007 – 2011 г. са публикувани 23 статии със забелязани 14 цитата.

Базата-данни *Scopus – author index*, възоснова на научните публикации на д-р Неделчева-Антонова, за периода 1996 – 2011 г. изчислява h-индекс 7, а за последните 5 г. от 2007 до 2011 г. изчислява h-индекс 3 на авторката. За последните пет години интензитетът на работа (отразен като брой излезли от печат статии за година) на д-р Антонова е значително нараснал. За периода 1996 – 2011 г. се отчита интензивност от 2 публикации годишно, докато за последните 5 години тази интензивност нараства на 4,5 публикации годишно.

В работата на д-р Антонова има и определено научно-приложни приноси. Те касаят главно разработване на методи за хроматографски и масспектрален анализ в различни сфери на научните изследвания и промишлеността.

Учебната дейност на д-р Антонова е свързана с провеждане на активна работа с дипломанти и стажанти. Оказване на практическа и методична помощ при провеждане на упражнения със студенти от различни бакалавърски и магистърски програми, в сътрудничество с преподаватели от СУ “Св. Кл. Охридски”.

Проектна дейност е представена с участие в 11 проекта финансирани от Националния фонд научни изследвания, 2 проекта финансирани от БАН и 2 научно приложни проекта. Участвала е при организиране и координиране на участието на Лабораторията по Инструментален анализ на ЛТУ в международните програми за оценка на достоверността на

анализите на почви, растителни и водни проби (Interlaboratory exchange program organized by University of Wageningen, 1998-2000). Участвала е при е в управление на проекти, като организационен мениджър на проект за институционално партньорство „Balkan-Swiss Network for teaching and research on functional properties of organic molecules used in advanced technologies (2002; Institutional Partnership 7 IP 65595 under programme SCOPES 2000 – 2003 of SNSF).

В заключение мога да отбележа, че научно-изследователската дейност на д-р Даниела Антонова е в областта на обявения конкурс, като приносите ѝ имат доказан приложен и фундаментален характер. Наукометричните показатели, на кандидатката, отговарят на изискванията на "Закона за развитието на академичния състав в Република България" за присъждане на академичното звание "Доцент" и са в съгласие с приетия "Правилник за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в ИОХЦФ при БАН". С научните си резултати д-р Антонова доказва, че е един изграден изследовател, в областта на инструменталния анализ – хроматографски методи за разделяне и маспектрометрия, с значителен потенциал за последващо кариерно развитие.

Това ми дава основание убедено да препоръчам на уважаемото Жури и на Научния съвет към Института по органична химия с център по фитохимия към БАН да присъди на д-р Даниела Валетинова Неделчева-Антонова академичната длъжност "Доцент" по специалността "Аналитична химия" – 01.05.04, за нуждите на Лабораторията по инструментална хроматография и маспектрометрия, към ИОХЦФ към БАН.

София 15.11.2011 г.

Рецензент:

(доц. д-р Хр Чанев)