

АВТОРСКА СПРАВКА ЗА ПРИНОСНИЯ ХАРАКТЕР НА НАУЧНИТЕ ТРУДОВЕТЕ,

представени за участие в конкурс за заемане на академична
длъжност „доцент“, професионално направление 4.2
Химически науки (Теоретична химия), ДВ. бр. 52/2.07.2019 г.
на гл. ас. д-р Мирослава Недялкова

автор на справката: М. Недялкова

28.08.2019

Кратко описание на най-важните научни приноси в приложените трудове

1 Обобщени данни за публикации и цитатите:

Общ брой научни публикации: **31** (включват глава от книга и монография)

Общ брой научни публикации за участие в конкурса: **16** (включват монография, която не е представена като основен хабилитационен труд)

От тях брой научни статии в списания с известен импакт фактор: **23**

Глава от книга: **1** (издателство: Nature Springer)

Монография: **1** (издателство: Lambert Academic Publishing)

Брой забелязани цитирания: **76** (самоцитатите са изключени от тази бройка)

1.1 НАУЧНИ ПРИНОСИ

Номерацията на статиите следва списъка на статиите за участие в конкурса:

- 1 М. Nedyalkova, S. Madurga, M. Tobiszewski, and V. Simeonov,
Calculating the partition coefficients of organic

solvents in octanol/water and octanol/air, Journal of Chemical Information and Modeling, vol. 59, no. 5, pp. 2257–2263, 2019.

- Основен принос:

Разработен е изчислителен протокол за предсказване на коефициентите на разпределение за n-октанол/вода и октанол/въздух за група полярни разтворители, чрез приложение на теорията на функционала на плътността (DFT) в комбинация с модел на солватиране (SMD). Получените резултати са в отлично съответствие с експериментални данни.

Представената методика е първият изчислителен подход за прогнозиране на коефициентите на разпределение октанол-въздух, чрез който се постига голяма точност и прецизност.

- 2 L. Naneva, M. Nedyalkova, S. Madurga, F. Mas, and V. Simeonov,
Applying discriminant and cluster analyses to separate allergenic from non-allergenic proteins, Open Chemistry, vol. 17, no. 1, pp. 401–407, 2019

- Основен принос

Въвеждане на нов тип дескриптори за целите на класификационната задача, основани

на повърхностните свойства на протеините и скали за хидрофобност на аминокиселините

Използване на кластерен анализ (йерархичен и нейерархичен) за разделяне на протеини в класове „алергени“ и „неалергени“

Извеждане на „мотив за алергенност“ на базата на кластерен анализ (триптофан)

- 3 D. Dimitrov, M. Nedyalkova, B. Donkova, and V. Simeonov, Chemometric assessment of soil pollution and pollution source apportionment for an industrially impacted region around a non-ferrous metal smelter in Bulgaria, *Molecules*, vol. 24, no. 5, pp. 83–92, 2019

- Основен принос

Идентифициране на латентни фактори, характеризиращи специфичните източници на замърсяване локализиращи в промишлен район (металургичен комбинат за производство на цветни метали)

Количествена оценка на приноса на всеки от идентифицираните фактори във формиране на общата концентрация на замърсители в почвата на региона чрез моделиране по метода на регресия по главни компоненти

Оценка на възможността за използване на растение (зелева култура) като биомонитор на замърсяването и като средство за ремедиация на почвата; Времева и пространствена оценка на взаимните връзки между районите на мониторинг

- 4 M. Nedyalkova, V. Antonov, "Manganese oxalates-structure-based Insights". *Open Chemistry*. vol. 16. pp. 1176-1183, 2018

- Основен принос

Чрез периодични квантово-химични изчисления с WIEN2k програмен пакет бяха симулирани за първи път ЯМР спектрите в твърда фаза за две кристалохидратни форми на алфа и гама - манганови оксалати.

Процесът на дехидратация на $MnC_2O_4 \cdot 2H_2O$ е симулиран чрез молекулярна динамика.

Също така са извършени симулации за определяне на магнитната възприемчивост на разгледаните манганови оксалати.

- 5 N. Szczepańska, B. Kudlak, S. Tsakovski, G. Yotova, M. Nedyalkova, V. Simeonov, A. Dołęga, J. Namieśnik, "Modeling and MANOVA studies on toxicity and endocrine potential of packaging materials exposed to different extraction schemes". *Environmental Research*, vol. 165, pp. 294 - 305, 2018,

- Основен принос

За пръв път са изведени оригинални регресионни модели за връзката между екотоксичност на екстрактите от опаковъчен материал и различни експериментални условия на съхранение и обработка на опаковките

Валидността на моделите и значимостта на регресионните коефициенти в моделите са потвърдени чрез прилагане на статистически методи за оценка на ефекта на фактори

Изведени са и коментирани най-значимите влияния върху оценката на екотоксичност на различни опаковъчни материали, измерена чрез два независими биотеста

- 6 M. Tobiszewski, M. Nedyalkova, S. Madurga, F. Pena-Pereira, Jacek Namieśnik, V. Simeonov, "Pre-selection and assessment of green organic solvents by clustering chemometric tools". *Ecotoxicology and Environmental Safety*, vol. 147, pp. 292 - 298, 2018

- Основен принос

Предложен е оригинален подход за предказване на липсващи параметри - $\log P_{o/w}$, $\log P_{o/a}$, $\log BCF$, необходими за оценка на „зеленост“ на органични разтворители

Доказано е съответствие между експериментално наличните и изчислени по модела стойности за редица определящи „зеленост“ параметри

Определени са и групи на подобие както между физикохимичните параметри, свързани със „зелеността“ на органични разтво-

рители, така и между самите полярни и неполярни разтворители с методите на многовариационната статистика.

- 7 N. Szczepanska, B. Kudlak, M. Nedyalkova, V. Simeonov, J. Namieśnik, "Application of chemometric techniques in studies of toxicity of selected commercially available products for infants and children". *Environmental Monitoring and Assessment*. vol.189, pp. 309 - 318, 2018

- Основен принос

Изследвани са за първи път взаимните връзки между експерименталните условия за екстракционна процедура на бебешки и детски продукти при оценка на екотоксичността им чрез прилагането на различни екотоксични биотестове

Доказана е съществената роля на времето за контакт при екстракция във всички екстракционни среди

Създаване на експертен подход за оценка на екотоксичността при условия, имитиращи реалните при ползване на продуктите за деца (игралки, биберони)

- 8 H. Hristov, M. Nedyalkova, and V. Simeonov, "Boron oxide glasses and nanocomposites: synthetic, structural and statistical approach". *Journal of materials science technology*, vol. 33, no. 6, pp. 535–540, 2017

- Основен принос

Предложен е оригинален подход за оценка влиянието на експерименталните условия върху структурните изменения на нанокomпозитните системи (хибридни боратни форми) чрез прилагане на кластер анализ на ИЧ-спектралните данни като метод за класификация на системите

- 9 M. Nedyalkova, B. Donkova, and V. Simeonov, "Chemometrics Expertise in the Links Between Ecotoxicity and Physicochemical Features of Silver Nanoparticles: Environmental Aspects". *Journal of AOAC International*. vol. 100, pp.359 - 364, 2017

- Основен принос

Класификация на системи от сребърни наночастици по отношение на тяхната акутна екотоксичност и дефиниране на дискриминатори за създадените класове на подобие

Експертна оценка на взаимните връзки между екотоксичност на наночастици и физико-химичните им параметри

Оценка на фактори, влияещи на екотоксичността чрез методите на многовариационната статистика

- 10 D. Dimova, S. Pisov, N. Panchev, M. Nedyalkova, S. Madurga, and A. Proykova, "Insight into electric field-induced rupture mechanism of water-in-toluene emulsion films from a model system, *The Journal of chemical physics*" vol. 146, no. 19, pp. 19 703–19 719, 2017

- Основен принос

Проведени са класически атомистични молекулно-динамични (МД) симулации за определяне механизма на електропорация на тънък толуенов емулсионен филм при контакт с водна фаза чрез прилагане на външно поле.

Атомистичните МД симулации са приложени за разработване на модел за проследяване на етапите на скъсване на толуеновия филм.

Показана е добра корелация на стойностите на критичното поле с експериментално измерените стойности

- 11 S. Madurga, M. Nedyalkova, F. Mas, J.-L. Garces, "Ionisation and conformational Equilibria of Citric Acid: Delocalized Proton Binding in Solution". *The Journal of Physical Chemistry A*, vol.121, no.31, pp.5894-5906, 2017

- Основен принос

Определена е стойността на рКа на лимонена киселина за първи път чрез прилагане на разработен site binding (SB) модел

Разработен е изчислителен протокол за определяне на микросъстоянията на различните форми на разглежданата киселина

Доказано е делокализирано положение на протон между отделните карбоксилни групи на разглежданата система чрез възникването на SSLB - short, strong, low-barrier водородни връзки

- 12 M. Nedyalkova, B. Donkova, J. Romanova, S. Madurga, G. Tzvetkov, V. Simeonov, "Iron oxide nanoparticles – In vivo / in vitro biomedical applications and in silico studies". *Advances in Colloid and Interface Science*, vol. 249, pp.192-212, 2017

- Основен принос

Направен е обзорен преглед на биомедицинските приложения на функционализирани наночастици от железен оксид (IONPs) като средства за приложение в образната диагностика

Представени са обобщени данни за токсичност на магнитните наночастици, отнасяща се до *in vitro* и *in vivo* биомедицинските приложения

Направен е обзор на известните в литературата компютърни модели

- 13 E. Kozuharova, M. Nedyalkova, G. Gergov, V. Simeonov, "Multivariate statistical classification of plant features - the case with *onobrychis pindicola* subsp. *urumovii* degen dren". *Comptes rendus de l'Academie bulgare des Sciences*, vol.70,pp.1531-1539,2017

- Основен принос

За пръв път е приложен многовариационен статистически метод за различаване на два растителни таксона по морфологични показатели

Показано е, че таксонът е само един
Показано е чрез йерархично кластериране,

че признаците за втори таксон могат да бъдат смесени с регистрирането на специфични различия в местата на пробовземане и това да доведе до погрешно дефиниране на втори растителен вид

- 14 M. Nedyalkova, H. Hristov, V. Simeonov, "Statistical approach to study of lithium magnesium metaborate glasses". *Open Chemistry*. vol 15 no.1, pp.61-66, 2017

- Основен принос

Предложен е статистически подход (йерархичен кластер анализ) за анализ на набор от данни за боратни стъкла с цел групиране по физикохимични параметри и композиционен състав на стъклата за разкриване на потенциални връзки (сходство или различие)

- 15 M. Wiczerzak, B. Kudlak, G. Yotova, M. Nedyalkova, S. Tsakovski, V. Simeonov, J. Namiešnik, "Modeling of pharmaceuticals mixtures toxicity with deviation ratio and best-fit functions models". *STOTEN*, vol. 571, pp.259–268, 2016

- Основен принос

Предложен е оригинален модел за оценка на екотоксичността на компоненти на бинерна лекарствена смес чрез регресионно моделиране и корелационен анализ

Постигнати са нов тип оценки на взаимодействието на лекарства в лекарствени смеси по отношение на екотоксичност, измервана с различни биотестове

Валидността на новия модел е доказана с използване на описан в литературата друг метод за оценка на същия тип взаимодействие (независимо, синергично, концентрационно) върху екотоксичността

- 16 M. Nedyalkova, Book: *Computational study of soft Nanoparticles and effect of ions*, Lambert Publishing House, pp. 1-116, 2018

- Основен принос

Предложен е модел, базиран на класически атомистични молекулно-динамични (МД) симулации за описание на двоен електричен слой на хидрофобна сферична наночастица

Предложеният модел разглежда в детайли ефекта на разпределение на моно- и двувалентни йони и водни молекули, локализирани по граничния (най-външен) слой на "меката" наночастицата

Оценени са приносите и ефектът на проникване на водните молекули на граничната повърхност на разглежданата моделна "мека" наночастицата

Атомистични МД симулации са приложени за описание на процеса в рамките на времевата скала за реализиране на акумулация на допълнителен заряд по повърхността на моделна "мека" наночастица. Влиянието на водното обкръжение е отчетено експлицитно.