

## СТАНОВИЩЕ

от д-р Ления-Незае де Брито Гонсалвеш

доцент в Бургаски държавен университет „Проф. д-р Асен Златаров“,  
по област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика  
професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност Аналитична химия

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен „доктор“

по: област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика

професионално направление 4.2. Химически науки

докторска програма Аналитична химия

**Автор:** Ася Димитрова Христозова

**Тема:** „Развиване възможностите на газовата хроматография с масспектрометрична детекция чрез комбиниране със „зелени“ подходи за екстракция и моделиране“

**Научен ръководител:** доц. д-р Кирил Костов Симитчиев

### 1. Общо представяне на процедурата и докторанта

Със заповед № P22-486 от 21.02.2025 г. на Ректора на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“ (ПУ) съм определена за член на научното жури за осигуряване на процедура за защита на дисертационен труд на тема „Развиване възможностите на газовата хроматография с масспектрометрична детекция чрез комбиниране със „зелени“ подходи за екстракция и моделиране“ за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма Аналитична химия. Автор на дисертационния труд е Ася Димитрова Христозова, докторантка в редовна форма на обучение към катедра „Аналитична химия и компютърна химия“ с научен ръководител доц. д-р Кирил Симитчиев от ПУ „Паисий Хилендарски“.

Представеният от докторантката комплект материали на хартиен носител е в съответствие с Чл.36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ, включва всички необходими документи.

Ася Христозова е завършила бакалавърска степен по специалност „Биология и химия“ в ПУ „Паисий Хилендарски“. След това е придобила магистърска степен по „Медицинска химия“, както и втора магистърска степен по „Спектрохимичен анализ“ в същия университет. Професионалният ѝ опит обхваща над 15 години в областта на аналитичната химия и фармацевтичния анализ, включително дългогодишна работа като хроматографист и LIMS-специалист в „Чайкафарма Висококачествените лекарства“ АД. От 2020 г. е асистент и докторант в Катедра „Аналитична химия и компютърна химия“ към ПУ „Паисий Хилендарски“,

а в периода 2022–2024 г. изпълнява длъжността химик във Фармацевтичния факултет на Медицински университет – Пловдив. Научната ѝ дейност включва публикации в реномирани международни списания, участия в научни конференции и включване в национални и международни изследователски проекти.

Дисертационният труд на Ася Христовова е с общ обем от 165 страници. Съдържанието на дисертационния труд е структурирано в седем основни раздела: Въведение (стр. 3 – 4), Литературен обзор (стр. 5 – 39), Материали и методи (стр. 40 – 50), Резултати и дискусия (стр. 51 – 113), Изводи и заключения (стр. 114 – 115), Приноси (стр. 115 – 116) и Научни съобщения (стр. 116 – 117). В труда са цитирани 306 литературни източника, повече от половината от които са публикувани през последните 10 години. Експерименталните резултати са представени в 38 таблици и илюстрирани с 25 фигури. Към дисертацията са приложени четири приложения.

## **2. Актуалност на тематиката**

Разработеният в дисертационния труд на Ася Христовова проблем е с висока актуалност, тъй като се отнася до стратегически важна област в съвременната аналитична химия – усъвършенстването на инструменталния анализ чрез интегриране на екологосъобразни екстракционни техники и подходи за моделиране. Тематиката е в пълно съответствие със съвременните тенденции за устойчиво развитие на аналитичните методи, формулирани в рамките на зелената и бялата аналитична химия, и отразява необходимостта от внедряване на иновативни подходи за редуциране на вредните въздействия върху околната среда, намаляване на ресурсната консумация, подобряване на аналитичната ефективност и икономическата приложимост на метода.

В областта на газовата хроматография с масспектрометрична детекция (GC-MS) за качествен и количествен анализ на летливи и полуетливи органични съединения, съществуващите методи за пробоподготовка са често свързани с използването на токсични разтворители, дълги и енергоемки процедури и ограничена селективност. В този контекст изследването и разработването на иновативни екстракционни техники, както и интегрирането на хеометрични модели, допринасят съществено за повишаване на чувствителността и ефикасността на аналитичните методи. Валидирането на разработените методи върху реални проби демонстрира тяхната практическа приложимост в области като контрол на хранителната безопасност, анализ на натурални продукти и мониторинг на замърсители, като по този начин се подчертава високата научна и приложна стойност на дисертационното изследване.

## **3. Познаване на проблема**

Разработката на докторанта се отличава с актуален и добре аргументиран избор на тематика, която съответства на водещите тенденции в съвременната аналитична химия. Литературният обзор е изграден върху анализ на 290 източника, като значителна част от тях са публикувани през последното десетилетие. Това подчертава добрата ориентация на автора в

най-новите научни постижения и осигурява солидна основа за разработване на поставените задачи.

Съдържанието на литературната справка е структурирано прецизно, в съответствие с целите на дисертацията, а представените източници са разгледани с аналитична прецизност и критичност. Наред с обобщаването на утвърдени научни резултати, са открити и аспекти, които остават недостатъчно изяснени в досегашните изследвания. Впечатление прави задълбоченият и уравновесен подход при анализа на информацията, при който докторантът демонстрира умения за систематизиране на сложни данни, открояване на съществени връзки и формулиране на аргументирани изводи. Това свидетелства не само за високата научна подготовка на автора, но и за успешно овладяване на образователните и изследователски компетентности, заложили в докторската програма.

#### **4. Методика на изследването**

Дисертационния труд демонстрира ясно формулирана и теоретично обоснована изследователска цел – проучване на възможностите за съчетаване на GC-MS/MS с екологосъобразни („зелени“) подходи за качествен и количествен анализ. Поставените девет изследователски задачи – три, свързани с анализ на летливи компоненти в етерични масла, и шест, фокусирани върху количествено определяне на пестициди в различни матрици – са конкретни, логично структурирани и напълно съответстват на целта на дисертацията. Протоколите и експерименталните условия са прецизно описани. Разработката стъпва върху прилагането на иновативни екстракционни техники, като твърдофазна микроекстракция в газова фаза (HS-SPME), микровълново подпомогната екстракция при температура на коагулация (MW-CPE) и дисперсивна течност-течна микроекстракция с дълбоко евтектичен разтворител (NADES-based DLLME). Изследванията са проведени с помощта на високотехнологична апаратура (GC-MS/MS, GC-MS, UV-VIS спектрофотометър, микровълнова система и др.), а хроматографските условия са оптимизирани за анализ както на етерични масла, така и на органохлорни и органофосфорни пестициди. В допълнение, изчисленията на линейните индекси на задържане, изграждането на модели чрез множествена линейна регресия и прилагането на хемометрични методи свидетелстват за задълбочен аналитичен подход и висока статистическа обоснованост на получените резултати. В обобщение, методологичната рамка на дисертационната работа е научно издържана и отговаря на високи съвременни стандарти в аналитичната химия.

#### **5. Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите**

Разгърнатото изследване се отличава с прецизна структура, теоретична дълбочина и яснота на научния замисъл, като всяка глава допринася логично за цялостното постигане на целите. Стъпвайки на обоснована методологична последователност и прилагане на високи аналитични стандарти, се осигурява висока достоверност на резултатите и валидност на направените изводи. Съчетанието между съвременни инструментални методи, иновативни под-

ходи и аналитична прецизност формира надеждна основа за формулиране на следните научни и научно-приложни приноси, представени тук обобщено: i) Изградена е база данни с линейни индекси на задържане за 122 съединения, съдържащи се в етерични масла, и е предложен нов, лесно приложим QSRR модел за тяхното прогнозиране чрез GC-MS и GC-MS/MS; ii) Създаден е оптимизиран протокол за определяне на 19 органохлорни и органофосфорни пестицида чрез GC-MS/MS, в който са интегрирани два иновативни екстракционни подхода – микровълново подпомогната екстракция при температура на коагулация и дисперсивна течно-течна микроекстракция с дълбоко евтектичен разтворител от природен произход; iii) Валидирани са методи, които демонстрират силно изразен „зелен“ характер и висока аналитична чувствителност, включително доказателства за положителния ефект на екстрагентните фази върху инструменталната детекция и границите на откриване; iv) Практическото приложение на разработените методи е потвърдено чрез успешен анализ на реални проби – плодови сокове и бутилирани изворни води. Значимостта на тези приноси се изразява в устойчивата трансформация на пробоподготовката чрез елиминиране на токсични разтворители и въвеждането на екологосъобразни алтернативи с доказана аналитична ефективност. Предложените модели и процедури не само разширяват приложното поле на GC-MS/MS, но и предоставят надеждни инструменти за бъдещи изследвания в контекста на „зелената“ аналитична химия.

## **6. Преценка на публикациите и личния принос на докторанта**

Представените резултати от дисертационния труд са отразени в две научни публикации в реферирани списания – *Talanta* (Scopus, SJR 2023 = 0.956, Q1) и *Acta Chromatographica* (Scopus, SJR 2023 = 0.344, Q2). Във всички публикации докторантката е на първо място, което показва значителния ѝ личен принос в изследванията и в подготовката на публикациите. До момента са забелязани шест независими цитата на тези публикации, което допълнително потвърждава научната значимост, актуалността и видимостта на изследването в международен контекст. В съответствие с изискванията на ЗРАСРБ, ППЗРАСРБ и ПРАС на ПУ „Паисий Хилендарски“, представените материали не само напълно покриват, но в определени аспекти и надвишават наукометричните критерии за присъждане на образователната и научна степен „доктор“. Дисертационният труд, авторефератът и придружаващата документация се характеризират с висока степен на изчерпателност, методическа прецизност и стриктна структурна организация, което допринася за професионалното и аргументирано възприемане на цялостния изследователски принос.

## **7. Автореферат**

Авторефератът (31 стр.) е в съответствие със съдържанието на дисертационния труд и представлява негово резюмирано, но съдържателно представяне. Той отразява обективно постигнатите резултати и направените анализи, подчертавайки основните научни приноси.

Преводът на английски език (30 стр.) допринася за по-широката международна видимост на изследването.

#### **8. Препоръки за бъдещо използване на дисертационните приноси и резултати**

Не познавам лично докторантката, но актуалната тематика на изследването, високото научно ниво на дисертационния труд и свързаните с него публикации са достатъчно убедителни индикатори за нейната амбициозност, научна зрялост и способност да провежда висококачествени изследвания. Изградените аналитични и методологични умения ясно показват нейния потенциал за устойчиво академично развитие в една от динамично развиващите се области на съвременната аналитична химия. Горещо препоръчвам изследванията в тази посока да бъдат продължени и разширени в рамките на мултидисциплинарен научен колектив, което би спомогнало за още по-висока приложимост и научна добавена стойност.

#### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Дисертационният труд представя оригинални научни и научно-приложни резултати, които напълно отговарят на изискванията, регламентирани в ЗРАСРБ, ППЗРАСРБ и ПРАС на ПУ „Паисий Хилендарски“. Чрез проведеното изследване докторантката Ася Христозова демонстрира задълбочени теоретични познания и висока научна компетентност в областта на аналитичната химия, като убедително доказва способност за самостоятелно провеждане на научни изследвания на високо професионално ниво. Въз основа на представения дисертационен труд, автореферат и постигнатите резултати и приноси, изразявам своята категорична положителна оценка и препоръчвам на уважаемото научно жури да присъди образователната и научна степен „доктор“ на Ася Димитрова Христозова в област на висше образование 4. „Природни науки, математика и информатика“, професионално направление 4.2. „Химически науки“, докторска програма „Аналитична химия“.

03.05.2025 г.

**Изготвил становището:** .....

(доц. д-р Л. Гонсалвеш)