

Описание на досегашната научна работа

В края на 2013 г., по време на обучението си като бакалавър 2-ри курс в ХТМУ, специалност „Неорганични химични технологии“ пред мен се откри възможност да започна стаж по програма „Студентски практики“ (МОН) в Центъра по ЯМР спектроскопия към ИОХЦФ-БАН, при проф. дхн Светлана Симова. Под нейно ръководство се запознах с физичните и химични основи на ЯМР спектроскопията, с основните едномерни (^1H , ^{13}C) и двумерни (COSY, TOCSY, HSQC, HMBC) техники за регистриране на спектри и с тяхната интерпретация. Основната задача по време на стажа ми беше отнасяне на сигналите в ^1H и ^{13}C спектри на редуциращи и нередуциращи моно-, ди-, три- и тетразахариди, както и идентифицирането им в спектри на пчелен мед. Тогава се породих интересът ми към приложението на ЯМР спектроскопията за анализ и контрол на хранителни и природни продукти. От март 2014 г. бях назначена на позицията техник-химия в Института, като натрупаният ми опит в анализа на спектри на сложни смеси ми позволи успешното разработване и защита (през 2016 г.) на дипломна работа по изследване на захарния профил на пчелен мед, с основен акцент откриване на характеристики и/или маркери, позволяващи отличаване на български манов мед от български нектарен мед под ръководството на проф. Светлана Симова и проф. Иван Митов (Институт по катализ-БАН). Освен разграничаването на меда по ботанически произход чрез хеометрични методи (кълъстерен анализ, принципен компонентен анализ, графики тип „кутия“, дисперсионен анализ, линеен дискриминантен анализ) бяха установени 17 вещества, по чието количество е възможно разпознаване на региона, в който е произведен пчелният мед. Бакалавърската ми дипломна работа „Инструментални и статистически методи за анализ на мед“ беше сред наградените в проведения Национален конкурс „За най-добра дипломна работа“ на Аквахим и Съюза на химиците в България.

Поради засиления ми интерес към спектралните методи за структурно охарактеризиране на индивидуални съединения и количественото им определяне в различни храни продължих своето обучение със записване за образователна степен „магистър“ в СУ „Св. Климент Охридски“, специалност „Съвременни спектрални и хроматографски методи за анализ“. Тогава под ръководството на проф. Светлана Симова и д-р Явор Митрев започнахме изследвания върху химичния състав на българско вино, произведено от широко разпространените сортове грозде – Каберне Совиньон, Мерло, Сира, Совиньон Блан и Шардоне посредством ЯМР спектроскопия. В протонни спектри бяха идентифицирани 40 вещества, като освен захариди бяха установени алкохоли, органични киселини, аминокиселини, фенолни компоненти и алдехиди. Посредством прилагане на многовариационни статистически методи към количествените данни на четиридесетте съединения бяха открити 21 вещества, чрез които е възможно различаване на отделните видове вино, както и географския регион на лозето. Получените резултати бяха обобщени в дипломна работа на тема „Приложение на ЯМР спектроскопия за изследване на български вина“. След успешна защита бях силно мотивирана да започна редовна докторантура, съсредоточена върху разработването на метод, предоставящ възможност за надеждното установяване на качество и автентичност на някои хранителни продукти. През 2018 г. станах докторант с тема на дисертацията „ЯМР метаболомика“. Метаболомиката намира приложение в хранително-вкусовата промишленост при контрол на качеството, като за установяване на най-често срещаните измами с храни (фалшифициране и неправилно етикетиране), най-широко използвано е метаболитното профилиране. Основните ми изследвания по време на докторантурата бяха съсредоточени върху захарния профил на 16 вида пчелен мед (манов (от иглолистна растителност, дъб и кестен), смесен (смес от манов и

нектарен), нектарен (от кориандър, цитрусов цвят, малинов цвят, магарешки бодил, рапица, мащерка, лавандула, липа, акация, слънчоглед и многоцветен) и разреден), определен чрез ^{13}C спектри и върху анализа на 14 вида вино (сред които 4 типично български сорта – Широка мелнишка лоза, Мавруд, Мелник 55 и Рубин), посредством ^1H ЯМР експерименти. Анализираните проби мед имат разнообразен географски произход, включващ 21 държави, като са изследвани и единични проби мед от безжилни пчели (произход Танзания), от мурсалски чай (България), евкалипт (Бразилия) и от тропическа растителност (о-ви Питкърн). Чрез проучването бяха установени компонентите, по чиито количества е възможно класифициране на отделните видове пчелен мед (по ботанически и географски произход) и разграничаване на вино по използваните за производство сортове грозде, както и откриване на разликите в химичния профил на местните български видове вино. В рамките на дисертацията беше разработен метод, позволяващ изчисляване стойността на оптичния ъгъл на пчелен мед, основаващ се на комбинация между количествените данни от ^{13}C ЯМР спектър и оптичния ъгъл на въртене на индивидуални захариди. Беше създаден бърз и надежден метод за доказване на качество на пчелен мед и вино. Освен мед и вино бяха анализирани и други хранителни и алкохолни напитки, богати на захари – два вида борово сладко и два вида медовина. Част от резултатите, получени за изследванията на пчелния мед са оформени в публикация, отличена като най-добра научно-приложна работа за ИОХЦФ-БАН за 2020 г.

Като докторант имах възможността да участвам в обучителен семинар „Осигуряване на качеството и безопасността на храни, напитки и фуражи“, чрез който придобих теоретически и практически познания за съвременни аналитични методи за установяване и количествено определяне на химични и микробиологични опасности в хранителни продукти, като сред лабораторните упражнения бяха сензорен и qPCR анализ. Взех участие в известните ЯМР училища – AMPERE NMR school (провеждано в Закопане, Полша) и G-NMR school (провеждано в Гьотинген, Германия), на които се запознах с DNP техники, многомерни методи за анализ на протеини, MRI и ЕПР спектроскопия на твърди вещества, приложение на компактни нискочестотни ЯМР спектрометри за анализ на хранителни и природни продукти, на обекти от архитектурата и изкуството. Взех участие в два online курса, организирани от Montpellier SupAgro – „Vine & Wine“ и от Agrocampus Ouest – „Exploratory Multivariate Data Analysis“.

Резултатите от проведените изследвания по време на цялата ми кариера са представени на 26 национални и международни форума чрез 12 устни и 25 постерни доклада, на които бях удостоена с 5 награди, като спечелих и грант за участие в конгрес, организиран от IUPAC в Париж, Франция. По време на работата ми в Института участвах в екипи на проекти, финансирани от ФНИ, Сдружение за научноизследователска и развойна дейност (СНИРД); по ННП „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“, ИНФРАМАТ, ЕБР (със Северна Македония и Сърбия) и Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти“, като част от проектите са свързани с характеризиране на природни или хранителни продукти.

Понастоящем съм асистент, отчислен с право на защита. Бих искала да продължа своята научна дейност в областта на ЯМР профилирането на храни и напитки, както и да обогатя опита си със съвременни инструментални и статистически анализи на екстракти от лечебни растения.

03.02.2021 г.


ас. инж. Десислава Гергинова