

Яна Николаева Цонева е завършила образователно-квалификационна степен „бакалавър“ в специалност „Екохимия и учител по Химия и опазване на околната среда“ и магистърска програма Изчислителна химия във Факултет химия и фармация на Софийския университет „Св. Климент Охридски“.

От 2013 г. е редовен докторант в катедрата по Физикомия на Факултет химия и фармация на Софийския университет „Св. Климент Охридски“.

Тема на дисертацията: „Молекулна организация на течна водна фаза на фазови граници“.

В периода от 24 юни до 27 юни 2014 г. по проект **BG051PO001-3.3.06-0040** „Изграждане на интердисциплинарни екипи от млади изследователи в областта на фундаменталните и приложни научни изследвания от значение за медицинската практика“ участва в работна среща “Superhydrophobicity, bubble stability, and heterogeneous nucleation” , проведена в Рим, Италия с постерна презентация на тема “Water Structuring at Different Fluid Interfaces: a Molecular Dynamics Study”.

Основна област на научни изследвания

Молекулна организация на течна водна фаза на фазови граници.

Научни публикации

- 1.Y. Tsoneva, A. Tadjer, M. Lelle, K. Peneva, A. Ivanova. Molecular dynamics structural study of a drug-peptide complex // Molecular Pharmaceutics, 2013, submitted
- 2.T. Mineva, Y. Tsoneva, R. Kevorkyants, A. Goursot. NMR ^{13}C chemical shift calculations of charged surfactants in water: a combined DFT and MD methodological study // Can. J. Chem., 2013, 91, 1-9
- 3.M. Velinova, Y. Tsoneva, A. Ivanova, A. Tadjer. Estimation of the Mutual Orientation and Intermolecular Interaction of C_{12}E_x from MD Simulations // J. Phys. Chem. B, 2012, 116, 4879–4888
- 4.M. Velinova, Y. Tsoneva, Ph. Shushkov, A. Ivanova, A. Tadjer. Systematic derivation and testing of AMBER force field parameters for fatty ethers from quantum mechanical calculations // Progress in Theoretical Chemistry and Physics, 2012, 22, 461-480

Участия в научни конференции

- 1.IRB Barcelona Biomed Conference “Frontiers in dynamics simulations of biological molecules”, November 4-8, 2013, Barcelona, Spain
Water Structuring: a Molecular Dynamics Study
Yana Tsoneva, M. Velinova, G. Madjarova, A. Tadjer
- 2.CECAM Workshop on “Coarse-graining multicomponent soft matter systems: equilibrium and dynamics”, August 21-23, 2013, Mainz, Germany
MD investigation of water organization
Yana Tsoneva, M. Velinova, G. Madjarova, A. Tadjer

3. XII Национална конференция по химия за студенти и докторанти, 15-17.05.2013 г.,
София
Молекулно-динамично изследване на доксорубицин и октааргинин
Я. Цонева, А. Иванова, А. Таджер (устен доклад)
4. Beyond Everest Workshop on “Advanced Functional Materials”, September 5-8, 2012,
Varna, Bulgaria
a) *Modelling of a Molecular Nanotransporter for Transfer of Hydrophobic Agents across Cell Membranes*
M. Velinova, Y. Tsoneva, Ts. Zahariev, A. Ivanova, S.-J. Marrink, A. Tadjer (oral)
b) *A multi-scale Computational Approach to Quantify Dynamic 14N parameters of organic template aggregates*
Yana Tsoneva, Tzonka Mineva (poster)
5. CECAM Workshop “Free energy calculations: From theory to applications”, June 4-8,
2012, Champs-sur-Marne, France
Aggregation Patterns of Dodecyl Oligo(ethylene glycol) Dimers in Aqueous Solution
M. Velinova, A. Ivanova, Y. Tsoneva, A. Tadjer (poster)
6. Заключителна работна научна среща по проект МАДАРА, 20-21.10.2011, София
Молекулно-динамични симулации на мицелообразуване в разтвори на C₁₂E_x
М. Велинова, Я. Цонева, А. Иванова, А. Таджер (устен доклад)
- 7.7th Congress of the International Society of Chemical Physics (ISTCP-VII), September 2-8,
2011, Tokyo, Japan
MD Simulations of Micelles Formation in C₁₂E_x Solutions
M. Velinova, Y. Tsoneva, A. Ivanova, A. Tadjer. (oral)
- 8.X Национална конференция по химия за студенти и докторанти, 17-19.05.2011 г.,
София
ОЦЕНКА НА МЕЖДУМОЛЕКУЛНИТЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И НА ВЗАИМНАТА
ОРИЕНТАЦИЯ НА C₁₂E_x ОТ МД СИМУЛАЦИИ
М. Велинова, Я. Цонева, А. Иванова, А. Таджер (устен доклад)
9. Fourth IRC-CoSiM Workshop, April 28 – May 1, 2011, Tryavna, Bulgaria
Estimation of the Mutual Orientation and Intermolecular Interaction of C12Ex from MD Simulations
M. Velinova, Y. Tsoneva, Ts. Zahariev, A. Tadjer, A. Ivanova (oral)
10. 3rd Symposium on Organic Chemistry, October 30 - November 2, 2010, Sofia, Bulgaria
a) *Multiscale molecular dynamics simulation of micelles from pentaethylene glycol monododecyl ether (C₁₂E₅) for drug delivery purposes*
M. Velinova, Y. Tsoneva, D. Sengupta, S. J. Marrink, A. Tadjer (poster)
б) *Systematic derivation and testing of AMBER force field parameters for fatty ethers from quantum mechanical calculations*
Y. Tsoneva, M. Velinova, A. Ivanova, A. Tadjer (poster)
11. 2nd Co-Nanomet Workshop: Modelling and Simulation at the Nanoscale, 29 - 30 October
2010, Sofia, Bulgaria

A force field extension for simulations of fatty ethers based upon ab initio electronic structure calculations on model molecules

M. Velinova, Y. Tsoneva, A. Ivanova, A. Tadjer (poster)

12. 2nd Workshop on Size-dependent Effects in Materials for Environmental Protection and Energy Application: SizeMat2, September 19-21, 2010, Nessebar, Bulgaria

a) Molecular Design of Micelles for Drug Delivery Purposes

M. Velinova, Y. Tsoneva, D. Sengupta, A. Ivanova, S-J. Marrink, A. Tadjer (oral)

b) Derivation and Testing of Molecular Mechanics Model of $C_y(EO)_x$ Based on ab initio Estimates of the Structural and Electronic Characteristics

Y. Tsoneva, M. Velinova, A. Ivanova, A. Tadjer (poster)

13. 15th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XV), August 31 - September 5, 2010, Cambridge, UK

Quantum-mechanical calculations and test of force field parameters for simulation of fatty ethers

M. Velinova, Y. Tsoneva, A. Ivanova, A. Tadjer. (poster)

14. 4th Humboldt Conference in Computational Chemistry, July 12-15, 2010, Varna, Bulgaria
Structural characteristics of models of the non-ionic surfactant $C_{12}(EO)_5$

Y. Tsoneva, M. Velinova, P. Shushkov, A. Ivanova, A. Tadjer (poster)

15. Работна научна среща по проект МАДАРА, 08.06.2010, София

Молекулното моделиране – средство или цел?

А. Таджер, А. Иванова, Г. Маджарова, Ю. Романова, М. Велинова, Ж. Петрова, Цв. Митева, С. Нинова, Я. Цонева (устен доклад)

16. IX Национална конференция по химия за студенти и докторанти, 18-19.05.2010 г., София

А) Извеждане и тестване на молекулно-механични параметри за симулиране на алканови етери

М. Велинова, Я. Цонева, А. Иванова, А. Таджер (устен доклад)

Б) Структурни характеристики на моделни системи от нейногенния сърфактант $C_{12}(EO)_5$

Я. Цонева, М. Велинова, А. Иванова, А. Таджер (устен доклад)

17. 120 години химическо образование в Софийски университет – Научна сесия на Химически факултет, 27.11.2009, София

От молекули към материали – теоретичен подход

Я. Цонева, М. Велинова, С. Нинова, Цв. Митева, Ю. Романова, А. Иванова, А. Таджер (устен доклад)

Участия в научни проекти

1. Структурна организация и диелектрични свойства на вода на фазова граница с неполярна среда, НИС на СУ „Св. Климент Охридски” 165/2013 г.

2. Електрични и електрохимични свойства на течните повърхности, ДВУ-90/2010 с НФ „Научни изследвания” към МОМН, 2010-2013 г.

3.Обратими нанотранспортери през течни фазови граници, ДО-02-256/2008 с НФ „Научни изследвания” към МОН, 2008-2012 г.

