

Югозападен университет „Неофит Рилски“

СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р инж. Данчо Любенов Даналев,

катедра Биотехнология на Химикотехнологичен и Металургичен

Университет - София

член на научно жури в конкурс за придобиване на ОНС „доктор“ по

научна специалност „Органична химия“, ПН 4.2. Химически науки,

определено със заповед на Ректора на ЮЗУ „Неофит Рилски“ №

I. Обобщени данни за научната продукция и дейността на кандидата

Представеният от докторантката Мария Христова Вакарелска-Поповска дисертационен труд на тема „Квантово-химични изследвания на монохидроксифлавонови и техни комплекси“ е комплексна разработка в областта на химическите науки, включваща в себе си теоретична, биоорганична и бионеорганична химия. Флаваноидите са нискомолекулни, широко разпространени в природата органични съединения, чиято основна функция в организмите е свързана с участието им в защитата от хиперокисление и предпазване от атаката на различни микроби и насекоми. Химията на флавононите съединения представлява все по-широк интерес за практиката поради редица открития, свързани с тяхната ниска токсичност и допълнителни биологични активности като антитуморна, хепатопротективна, антибактериална и др. Това предполага търсенето на нови потенциално активни структури за нуждите на фармацевтичния пазар. Квантово-химичните подходи дават възможност след проучване на ключови за появата на дадена активност дескриптори, чрез използване на различни приближения да се направят теоретични изчисления и на база получените резултати да се изведат заключения, предсказващи наличието на определени свойства за дадена молекула на

база присъствие на определен основен фрагмент или заместители в нея. Това позволява този подход да е ценен помощник в работата на химиците синтетици с цел целенасочен синтез на потенциално активни молекули с целенасочен ефект. В целият този контекст подбраната от докторантката и научния ѝ ръководител тема на дисертационния труд е актуална и разработването ѝ би било от съществена помощ за приложната химия. Постигнатите от докторантката резултати по време на разработване на дисертационния труд са систематизирани и обобщени в представените по темата на дисертацията **шест** научни публикации. От тях 2 в списание с и.ф., 2 в списания с SJR и 2 в специализирани научни списания. В 5 от тях докторантката е на първо място, а в една на втора позиция, което недвусмислено показва нейната основна роля в разработките. Всички публикации са по темата на дисертационния труд и описват постигнати и описани в хода на работата по него резултати. Получените резултати са докладвани на 9 престижни научни форума под формата на постери, което показва, че докторантката в своята образователна част от дисертационния труд се е научила да обобщава и представя по подходящ начин получените от нея резултати пред научната общност. Докторантката е взела участие и в разработването на 5 научни проекта, свързани с дисертационния труд. Целият посочен по-горе научен актив напълно задоволява изискванията на ЗРАС на РБългария, както и правилника за неговото приложение и позволява на кандидатката да придобие ОНС „доктор“ в претендираната от нея научна област и ПН.

II. Оценка на научните и на практическите резултати и приноси на представената за участие в конкурса творческа продукция

Дисертационния труд е развит на общо 143 страници, които включват и приложените спектрални данни за охарактеризиране на новополучените

комплекси на флаваноиди с Cu(II). Базирана е на завиден брой от 222 литературни източника, чрез които докторантката в логична последователност проследява химията и биохимията на флавоновите съединения, тяхните разнообразни активности и приложения в практиката и основните модели на квантово-химичния подход. Като логично заключение от така представения литературен обзор на дисертацията точно и конкретно е изведена и целта и поставените за нейното реализиране задачи. В ескперименталната част от дисертационния труд много точно и ясно са представени всички синтетични процедури за получаване на целевите съединения, което позволява при нужда бъдещото им повторно използване. Коректно са описани всички използвани техники за охарактеризиране на структурата на получените целеви флавонови комплекси с метала Cu(II) в различни съотношения при две различни рН на средата, както и приложения за определяна на антиоксидантната активност DPPH метод. Направени са редица изчисления свързани с ролята на ОН групата за биологичната активност на новосинтезираните комплекси, както и нейното поведение в различни моделни системи. Получените данни от направените анализи са коректно интерпретирани и дискутирани в светлината на собствени разсъждения на докторантката върху тях, както и сравняване с получени резултати по сходни съединения от други научни групи. Всички те са прилежно систематизирани под формата на таблици, фигури и диаграми, което позволява лесното им проследяване. Изведени и оптимизирани са структури на новополучените комплекси при различно рН.

Приносите от разработения дисертационен труд виждам в следните направления:

- теоретични изследвания

✓ намиране на оптималните структури на всички изследвани изомери монохидроксифлавонови и пресмятането на техните енталпии на дисоциации

по различните механизми, които описват склонността им за встъпване в реакция с активни радикали в организмите във вакуум и във вода;

✓ изясняване ролята на базовата структура върху радикал-улавящата активност на монохидроксифлавоните;

✓ определяне влиянието на позицията на хидроксилната група върху нейната активност;

- химични изследвания

✓ синтез на серия от Cu-комплекси на 3-хидроксифлавоон в различни съотношения 1:1, 2:1 и 3:1 (лиганд:метал) при рН 6 и 8;

✓ характеризирание структурата на новополучените Cu-комплекси на 3-хидроксифлавоон чрез използване на съвременни техники за структурен анализ;

- биологични изследвания

Определяне на антиоксидантния/прооксидантния потенциал на новосинтезираните Cu-комплекси на 3-хидроксифлавоон с помощта на DPPH метод.

Считам, че всички проведени от докторантката по време на разработване на настоящия дисертационен труд експерименти са спомогнали за придобиване на широки и специализирани знания в областта на теоретичната, биоорганичната и бионеорганичната химия, които напълно отговарят на претендираната от нея област за придобиване на ОНС „доктор“.

III. Критични бележки и препоръки

Към дисертационния труд нямам критични бележки. Автореферата на дисертацията напълно представя основните аспекти на дисертационния труд съгласно изискванията на ЗРАС и правилника за неговото приложение.

IV. Заключение

В подкрепа на всичко гореизложено и направения от мен, в рамките на моето становище, анализ на дейността на докторантката Мария Христова Вакарелска-Поповска по време на разработвания от нея дисертационен труд считам, че тя е изпълнила всички изисквания на ЗРАС и правилниците за неговото приложения свързани с придобиването на ОНС „доктор“ и гласувам **положително** да ѝ бъде присъдена ОНС „доктор“ в ПН 4.2. Химически науки, научна специалност Органична химия.

7.01.2022 г.

Член на журито:

(проф. д-р инж. Данчо Даналев)