

ЮГОЗАПАДЕН УНИВЕРСИТЕТ „НЕОФИТ РИЛСКИ“

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Мая Георгиева Чочкова –

преподавател в катедра „Химия“ на Югозападен университет „Неофит Рилски“

Относно: Дисертационен труд **„Квантово-химични изследвания на монохидроксифлавонови комплекси“**,

представен от докторантката Мария Христова Вакарелска-Поповска

за присъждане на образователната и научна степен **„ДОКТОР“**

в научна област 4. Природни науки, математика и

информатика

научно направление 4.2. Химически науки – Органична химия

I. Актуалност на тематиката

В дисертацията са представени квантово-химичните изследвания на докторантката Мария Вакарелска-Поповска върху структурните особености на флавоноидите, в частност на монохидроксифлавононите и техните Cu(II)-комплекси спрямо радикало-улавящата активност.

Добре известно е, че флавоноидите са повсеместно разпространени сред растителното царство и тяхната защитна функция се изразява в преодоляване на биотичния и абиотичния стрес. Полифенолната структура на тези вторични метаболити се свързва най-вече с антиоксидантния им потенциал.

Тематиката на дисертацията е актуална, тъй като свободно-радикаловите процеси в организма се свързват с патогенезата на редица социално – значими заболявания като невродегенеративни (болести на Алцхаймер, Паркинсон и др.), рак, диабет, сърдечно-съдови заболявания и др. Това определя и засиления интерес на учените през последните години към търсене на нови антиоксиданти както от природен, така и от синтетичен произход.

Тъй като присъствието на няколко хидроксилни групи в природните биологично

активни флавоноиди увеличава броя на факторите, отговорни за биологичната им активност, то това води до усложняване на квантово-химични изследвания. Ето защо, в настоящето проучване докторантката е заложила на по-прости модели като монохидроксифлавононите.

Съществуващите в литературата данни върху квантово-химични и експериментални изследвания на радикалното улавяне, отчитащи позицията на хидроксилната група в базовата 2-фенил-бензо[b]пиран-4-онова структура на флавононите не са много.

Допълнително свидетелство за актуалността на избраната тематиката са забелязаните 6 бр. цитати в *Scopus* върху една от публикациите на докторантката.

II. Обща характеристика на дисертационния труд

Материалът по дисертацията е представен на 143 страници и е структуриран по класическата схема - Увод, Литературен обзор, Цел и задачи, Експериментална част, Резултати и обсъждане, Изводи, Приноси и Използвана литература. Цитирани са 222 литературни източници, като 40% от тях са за последните 10-15 години, което показва отличното осведоменост на докторантката по разработваната актуална тема.

С оглед изпълнението на поставената цел, докторантката успешно е подбрала серия от квантово-химичните дескриптори за оценка на радикало-улавящата активност на съединенията. След направените теоретични изследвания тя провежда и експериментално тестване на DPPH[•] - улавящата активност на синтезираните от нея Cu(II) комплекси на 3-хидроксифлавонона. Структурата на получените комплекси е доказана чрез спектрални методи и елементен анализ, както и DFT/квантово-химични изчисления.

Резултатите от дисертацията са докладвани на девет научни форуми и оформени в 6 публикации, 3 бр. от които са индексирани в *Scopus* и една е подадена за печат. По тези наукометрични показатели докторантката напълно покрива изискванията за придобиване на ОНС „доктор“.

Авторефератът е написан в съответствие с утвърдените изисквания и описва в резюмиран вид съдържанието на дисертационния труд.

III. Критични бележки и препоръки

Към докторантката нямам критични бележки, но имам един въпрос:

Кое налага тя да се насочи към синтез и изследване на медни комплекси, именно с 3-ОН-флавола?

IV. Заключение

Считам, че представеният от Мария Вакарелска-Поповска дисертационен труд на тема *„Квантово-химични изследвания на монохидроксифлаволи и техни комплекси“* съдържа съществени приноси, които биха могли да бъдат използвани при дизайна на нови антиоксиданти, както и да послужат при определяне механизмите на радикало-улавящата активност на сродни „гасители“ на радикали.

Ето защо давам своята положителна оценка и убедено препоръчвам на почитаемите членове на Научното жури да присъди на Мария Христова Вакарелска-Поповска образователната и научна степен „ДОКТОР“ в научна област *4. Природни науки, математика и информатика* и научно направление *4.2. Химически науки – Органична химия*.

Дата:06.01.2022г.

Член на журито:

гр. Благоевград

(Доц. д-р Мая Чочкова)