

**ХІХ НАЦИОНАЛНА
КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ХИМИЯ ЗА СТУДЕНТИ
И ДОКТОРАНТИ**

02-04 юни 2021г. СОФИЯ



**ФАКУЛТЕТ ПО ХИМИЯ И ФАРМАЦИЯ
СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ „СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ“**

XIX Национална конференция по Химия за студенти и докторанти 2021
Програма и резюмета

Софийски Университет, Факултет по Химия и Фармация
бул. „Джеймс Баучер“ №1, София 1164

Web-страница на научната конференция:
<http://edurein.chem.uni-sofia.bg/scc2021/>

**XIX Национална конференция по Химия за студенти
и докторанти се организира от:**

**Факултет по Химия и Фармация на Софийския Университет "Св.
Климент Охридски"**

Хумболтовия Съюз в България

НАУЧЕН СЪВЕТ

чл.кор. проф. Тони Спасов, СУ

акад. проф. Христо Цветанов, БАН

чл.кор. проф. Константин Хаджииванов, БАН

чл. кор. проф. Николай Денков, СУ

проф. Пламен Петков, ХТМУ

проф. Юри Кълвачев, БАН

ОРГАНИЗАЦИОНЕН КОМИТЕТ

проф. Георги Вайсилов, СУ

проф. Християн Александров, СУ

проф. Петко Петков, СУ

гл. ас. Искра Колева, СУ

гл. ас. Ана Колева, СУ

ас. докт. Кристина Симеонова, СУ

докторант Николай Даскалов, СУ

студент Стоян Граматиков, СУ

Програма

2 юни 2021

- 09:30 10:00 **Регистрация**, пред 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ
- 10:00 11:00 **Откриване**, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ
Лекция на проф. Анели Неделчева,
„Интегриран подход при изследване на лечебните растения – съвременни предизвикателства и перспективи пред фармакогнозията“
- 130 аудитория ФХФ, СУ**
- Секция Методика на обучението по химия**
- 11:20 11:40 Калин Чакъров, Александрия Генджова
„Ученици и учители за областите на концептуални затруднения при изучаване на химия“
- Секция Полимери**
- 11:40 12:00 Camila Alves Claudino da Silva, Neli Koseva
„Glycolysis of Polyethylene Terephthalate (PET) - Literature Search“
- 12:00 12:20 Жана Ганчева, В. Илчева, В. Боев, Т. Петкова
„Органично-неорганични хибриди на основата на уреясиликати – синтез и аспекти на приложение“
- 12:20 12:40 Деница Николова, Й. Тупарова, Л. Христов, Х. Цачев, Е. Василева
„Нови лекарствени носители за тимолол малеат на базата на поли(сулфобетаин метакрилат) и хитозан“
- 12:40 13:40 **Обедна почивка**
- Секция Инженерна химия и химични технологии**
- 13:40 14:00 Памела К. Петрова, Лидия М. Димитрова, Светослав Е. Аначков
„Ефект на NaCl върху растежа на анионни/катионни мицели: реологични зависимости“
- 14:00 14:20 Десислава Глушкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков
„Образуване на метастабилни ротаторни фази в хексадеканови капки“
- 14:20 14:40 Анита Бисерова, Кръстина Цветкова, Десислава Глушкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков
„Изследване стабилността на формите на несферични алканови капки“
- 14:40 15:00 Кръстина Цветкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков
„Реологични свойства на ротаторни фази от линейни алкани“
- 15:00 15:20 Мартин Пантов, Десислава Глушкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков
„Спонтанно нанофрагментиране и получаване на двукратни емулсии от моделни триглицеридни смеси“
- 15:20 15:40 **Кафе-пауза**
- 15:40 16:00 Ралица Узунова, Румяна Станимирова, Теодор Гърков, Красимир Данов
„Адсорбция на летливи амфифили на междофазова граница и взаимодействието им с йонно повърхностно активно вещество“
- 16:00 16:20 Татяна Славова, Гургана Радулова, Красимир Данов
„Капсулиране на масла и парфюми в колоидозоми изградени от наночастици SiO₂, полимери и сърфактанти: ефект от размер на частиците“

XIX Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2021

- 16:20 16:40 Васил Георгиев, Надя Политова-Бринкова, Моника Христова, Славка Чолакова, Николай Денков
„Влияние на повърхностните свойства на смеси от ПАВ върху антипенителното действие на смесени антипенители“
- 16:40 17:00 Тюркийн Арнаудова, Надя Политова, Златина Митринова, Славка Чолакова, Николай Денков, David Gowney, Greg Miranda
„Пенообразуване и стабилност на неводни пени“
- 17:00 17:20 Вяра Йорданова, И. Лесов, С. Чолакова, Н. Денков
„Нарастване на мехурчета в дисперсии на полиоли при тяхното нагряване“
- 17:20 17:40 **Кафе-пауза**
- 17:40 18:00 Росена Крушовалиева
„Липозомите като система за прилагане на лекарствени вещества в очите“
- 18:00 18:20 Владимир Кътев, Захари Винаров, Славка Чолакова
„Механизми на солубилизация на лекарства от полярни липиди в модел на стомашно-чревния тракт“
- 18:20 18:40 Владимир Петков, Соня Цибранска, Захари Винаров, Славка Чолакова
„Изследване на разтворимостта на аморфни твърди дисперсии на глибенкламид в in vitro модел на стомашно-чревния тракт“
- 18:40 19:00 Делян Кръстев, Захари Винаров, Васил Атанасов, Славка Чолакова, Николай Денков
„In vitro модел за определяне разпределението на лекарствени продукти между моделна плазма и липидна емулсия“

3 юни 2021, 130 аудитория на ФХФ, СУ

Секция Изчислителна химия

- 09:00 09:20 Кристина Симеонова, Християн Александров, Петко Петков
„Квантовохимично изследване на механизма на формиране на 3,3'-диацетил-[4,4'-бихроман]-2,2'-дион“
- 09:20 09:40 Стоян Граматиков, Петко Петков, Георги Вайсилов
„Квантовохимично изследване на германиеви центрове в германосиликатни зеолити“
- 09:40 10:00 Янислав Данчовски, Христо Рашеев, Радостина Стоянова, Аля Таджер
„Молекулно моделиране на метални комплекси с лиганди хинонови производни за съхранение на Li-йони“
- 10:00 10:20 Христо Рашеев, Радостина Стоянова, Аля Таджер
„Моделиране на адсорбция и десолватация на моно- и диядрени солватационни комплекси върху електродна повърхност“
- 10:20 10:40 Кафе-пауза**
- 10:40 11:00 Любима Дашева, В. Николова, С. Ангелова
„Теоретично изследване на комплекси на включване на биологично значими макроелементи в кукурбитурили“
- 11:00 11:20 София Славова, Венелин Енчев
„Химична еволюция – образуване на птерини и гуанин от формамид“
- 11:20 11:40 Йоанна Стойчева, Аля Таджер, Юлия Романова
„Кумулени – ключ към мистерията на структурата на карбина“

11:40 12:00 Стоян Илиев, С. Цибранска, А. Иванова, С. Чолакова, Н. Денков
„Моделиране на кристализация на хексадекан в обем и на фазова граница с молекулна динамика“

12:00 13:00 Обедна почивка

13:00 13:20 Симона Джумайска, Георгия Иванова, Неда Тодорова, Юлиян Загранярски, Анела Иванова
„Моделиране на молекулни структури за емитери на синя светлина“

13:20 13:40 Любен Бориславов, Мирослава Недялкова, Аля Таджер, Юлия Романова
„Търсене на хромофори за синглетно разцепване чрез машинно обучение“

13:40 14:00 Гергана Костадинова, Румен Ляпчев, Аля Таджер, Marc de Wergifosse, Юлия Романова
„N-хетероциклени карбенови димери: нов клас хромофори за синглетно разцепване“

14:00 14:20 Васка Петакова, Мирослава Недялкова, Йоанна Стойчева, Аля Таджер, Юлия Романова
„С дирадикалов характер или без – това е въпросът“

14:20 14:40 Кафе-пауза

Секция Физикохимия

14:40 15:00 Мария Пимпилова, Ванина Иванова – Колчева, Мария Стоянова, Нина Димчева
„Разработване на нов Co_3O_4 -g- C_3N_4 - Nafion™ композитен катализатор за електрохимична редукция на пероксидни съединения във водна среда“

15:00 15:20 Невелин Борисов, Галин Борисов, Евелина Славчева
„Мултислойни никел-базирани електроди за водни електролизьори със "zero-gap" конфигурация“

15:20 15:40 Трифон Шопов, Албена Александрова, Мария Матракова, Борислава Младенова, Антония Стоянова
„Синтезиране на въглеродни ксерогелове и тяхното приложение в системи за съхранение на енергия“

15:40 16:00 Йоана Станимирова, В. Карастоянов
„Самоорганизиран полипирол нанопори, образувани чрез контролирана електрополимеризация върху подложка от Ti“

16:00 16:20 Кафе-пауза

Секция Аналитична химия

16:20 16:40 Мария Петрова, Алекс Русев, Стефан Аврамов
„Оптимизиране и валидиране на ВЕТХ методика за определяне на активните субстанции в сух екстракт от бял трън“

16:40 17:00 Лидия Кайнарова, Д. Георгиева, В. Стефанова
„Изследване приноса на шума на сигнала към неопределеността на размерите на единични наночастици, измервани чрез spICP-MS “

17:00 17:20 Ива Беловеждова, Валентина Любомирова
„Изследване възможностите на полуколичествен ICP-MS метод за охарактеризиране на течни и твърди отпадъци“

17:20 17:40 Кафе-пауза

Секция Неорганична химия

- 17:40 18:00 Яна Димитрова, Деница Еленкова, Румен Ляпчев, Йоана Захариева, Бернд Моргенщерн, Ден Димов
„Нови комплекси на лантаноиди с 2-(фенилетинил)-1,10-фенантролин“
- 18:00 18:20 Кристиян Веселинов, Деляна Маринова, Мария Калъпсъзова, Екатерина Жечева
„Литиево манганов сулфат като електрод за литиево-йонни батерии“
- 18:20 18:40 Елжана Енчева, Мартин Цветков, Мария Миланова
„Влияние на Dy^{3+} върху фазовия състав и кристалната структура на $Li_2Mo_3O_{12}$ “
- 18:40 19:00 Весела Стоянова, О. Костадинова, В. Желев, Е. Младенова, П. Петков, Т. Петкова
„Изследване на Ti-допирани BaCeLaO_{3-δ} керамики“

4 юни 2021, 130 аудитория на ФХФ, СУ

Секция Фитохимия и фармакогнозия

- 09:00 09:20 Христо Петков, Боряна Трушева, Вася Банкова
„Екстракция на биоактивни вещества от обикновен глог с природни дълбоко евтектични смеси“
- 09:20 09:40 Емине Саралиева, Ивайла Динчева, Юлиан Тумбарски, Надежда Петкова, Иван Иванов
*„Фитохимичен профил, антиоксидантна, антимикробна и ацетилхолинестераза инхибираща активност на етерично масло от корени на *Carlina acanthifolia* All. (*Carlinae radix*)“*
- 09:40 10:00 Ралица Чимширова, Амина Чакир, Милена Попова
„Химичен състав на прополис от слабо проучени райони на Мароко“
- 10:00 10:20 Виктория Иванова, Антоанета Трендафилова
*„Оптимизиране на условията за екстракция на биологично активни вещества от типа *Inula britannica*“*

10:20 10:40 Кафе-пауза

- 10:40 11:00 Иван Лаловски, Иван Свиняров, Анели Неделчева
„Лекарствени продукти без лекарско предписание (OTC): дял на растителните лекарствени продукти с АТС код R – дихателна система“
- 11:00 11:20 Диана Младенова, Димана Близнашка, Виктория Иванова, Калина Данова, Ина Анева, Антоанета Трендафилова
„Влияние на еволюционното развитие върху продукцията на вторични метаболити при видове кантарион в естествени и ин витро условия“
- 11:20 11:40 Асен Стоянов, Анели Неделчева
„Проучване върху растения от китайската традиционна медицина като компонент в съвременните фитопродукти“
- 11:40 12:00 Венелина Ангелкова, Иван Свиняров, Анели Неделчева
*„Изследване микроструктурата на хидратирани плодове от *Prunella vulgaris* L.“*

12:00 13:00 Обедна почивка

Секция Фармацевтична химия

- 13:00 13:20 Гергана Симеонова, Боян Тодоров, Валентина Любомирова
„Производство и модифициране на радиофармацевтика 18F-флуордезоксиглюкоза (18F-FDG)“

XIX Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2021

- 13:20 13:40 Ивет Иванова, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов
„Синтез на нови напроксенови производни на изохинолина и бета-карболина“
- 13:40 14:00 Стиляна Колева, К. Аничина, Д. Вучев, М. Аргирова, Н. Лумов, Д. Янчева
„Кондензирани триазинобензимидазоли: синтез, структурни изследвания и антихелминтна активност“
- 14:00 14:20 Мария Аргирова, Георги Момеков, Надя Христова-Авакумова, Мая Гунчева, Емилия Чернева, Камелия Аничина, Деница Янчева
„Нови 1Н-бензимидазол-2-ил-хидразони с антирадикалова, антипролиферативна активност и модулиращ ефект върху полимеризацията на тубулин“
- 14:20 14:40 Николай Лумов, Деница Янчева, Симеон Стоянов, Камелия Аничина
„Синтез и структурно охарактеризиране на нитроароматни бензимидазолви производни с потенциална предлекарствена активност“
- 14:40 15:00 Куентин Радев, Неда Анастасова, Надя Христова-Авакумова, Деница Янчева
„Синтез на хидразонов производни на индола и in vitro изследване на модулиращ ефект при желязо-индуцирано оксидативно увреждане“

15:00 15:20 Кафе-пауза

Секция Органична химия

- 15:20 15:40 Анна-Мария Златанова, А. Колева, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова
„Влияние на заместителите в кумариновия пръстен в реакции на димеризация на 3-ацетилкумарин“
- 15:40 16:00 Момчил Бенов, Георги Добриков, Ивайло Славчев, Иванка Николова
„Синтез на нови диарилетери и изучаване на тяхната in vitro антивирусна активност“
- 16:00 16:20 Дияна Димитрова, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов
„Хетерогенно-катализирана циклизация на амиди на 2-фенилетиламин с флурбипрофен за синтез на нови производни на 1,2,3,4-тетрахидроизохинолина“
- 16:20 16:40 Теодора Тодорова, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов
„Приложение на хетерогенно-катализирана циклизация за получаване на профенови производни на алкалоида Cherylline“

16:40 17:00 Кафе-пауза

- 17:00 17:20 Христо Манов, Десислава Станева, Станимир Стоянов, Иво Грабчев
„Нов меден комплекс на модифициран с 1,8-нафталимид ПАМАМ дендример и неговата антибактериална и антитуморна активност“
- 17:20 17:40 Моника Мутовска, Юлиан Загранярски
„Синтез на пери-заместени диалкокси 1,8-нафталимидни флуорофори“
- 17:40 18:00 Нина Русева, Емилия Д. Чернева, Адриана Г. Бакалова
„Пиридин съдържащи скварамиди – синтез, кристална структура и цитотоксична активност“
- 18:00 18:20 Любен Бориславов, Румен Ляпчев, Деница Еленкова, Невена Петкова, Петър Петров
„Изследване на възможностите за улавяне на нови N-хетероциклени карбени с бор и сяра“

18:30 19:00 Закриване, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

19:00 Коктейл

СЕКЦИЯ МЕТОДИКА НА ОБУЧЕНИЕТО ПО ХИМИЯ

Калин Чакъров ФХФ - СУ

УЧЕНИЦИ И УЧИТЕЛИ ЗА ОБЛАСТИТЕ НА КОНЦЕПТУАЛНИ ЗАТРУДНЕНИЯ ПРИ ИЗУЧАВАНЕ НА ХИМИЯ

Калин Чакъров¹, Александрия Генджова²

^{1,2}*Лаборатория по химическо образование, история и философия на химията,
Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, София 1164,
бул. „Джеймс Баучър“ 1
chakarov_kalin@yahoo.bg; agendjova@chem.uni-sofia.bg*

Химията често се възприема като труден предмет, а начинът, по който учениците възприемат ученето, влияе върху техните резултати.

Настоящото изследване търси информация от ученици и учители за това: кои теми от учебната програма по химия и опазване на околната среда са трудни за учащите; какви са причините и начините за преодоляване на затрудненията им.

За целта е проведено анкетно проучване сред 321 ученици на 16 – 17 - годишна възраст и 20 учители по химия.

Установено е, че и двете изследвани групи преценяват като трудни тези теми, които главно съдържат абстрактни понятия, изискват математически умения или имат специфична логика, терминология и символика. Като цяло са установени проблеми, свързани с информационно претоварване на учащите, необходимост от акцентирание на връзките с практиката и от осъзнаване на важноста от развитие на ключови умения.

Резултатите от изследването могат да послужат за подобряване на учебните програми и практиката на обучението по химия и опазване на околната среда.

Key words: *Students' Perceived difficulties, Chemistry teachers' view, Chemistry education.*

СЕКЦИЯ ПОЛИМЕРИ

Camila Alves Claudino da Silva, ФХФ – СУ

Жана Ганчева, ИЕЕС – БАН

Деница Николова, ФХФ – СУ

GLYCOLYSIS OF POLYETHYLENE TEREPHTHALATE (PET) – LITERATURE SEARCH

Camila Alves Claudino da Silva¹, Neli Koseva²

¹Sofia University "St. Kliment Ohridski", Faculty of Chemistry and Pharmacy, Laboratory on structure and properties of polymers

1 James Bourchier Blvd, 1164 Sofia, Bulgaria

*²Institute of Polymers, Bulgarian Academy of Sciences
Akad. G. Bonchev Str, Bl. 103A, Sofia 1113, Bulgaria*

Polyethylene terephthalate (PET) is a thermoplastic polymer with various applications such as food packaging (e.g. bottles), non-food packaging (e.g. cosmetics), fibers for textiles and carpets [1]. There are two methods of PET synthesis: esterification reaction of ethylene glycol (EG) and terephthalic acid (TA), with elimination of water; and transesterification reaction of dimethyl terephthalate (DMT) with excess of ethylene glycol (EG) and a basic catalyst (methanol) [2]. PET has extremely slow degradation rates [3] and the increase of its amount of waste has generated environmental problems [4] such as the high load of PET waste in landfills and disposal in marine ecosystems [5]. Recycling of PET has been receiving increasing attention as a way to manage the waste issue. PET recycling can be carried out by the following methods: mechanical recycling, consisting of melt reprocessing of post-consumer PET waste by extrusion or injection molding; chemical recycling, denoted by the depolymerization of PET waste via hydrolysis, methanolysis, glycolysis or aminolysis to obtain the starting monomers and/or oligomers; and incineration of PET waste for energetic gain [6]. The current work aims to present a literature search of glycolysis of PET, a method that consists on the molecular degradation of PET by glycols in the presence of transesterification catalysts [7]. The main focus of the literature search was to find different glycols that can be used in this reaction (dipropylene glycol, glycerol, neopentyl glycol, propylene glycol, polyethylene glycol 200, 400, 600, 1000 and 1500) other than the standardly used ethylene glycol (EG), as well as comparing the reactivities provided by these glycols. Additionally, applications of the PET degradation products are also presented.

References:

- [1] Forrest, M 2016, *Recycling of polyethylene terephthalate*, Smithers Rapra Technology, United Kingdom, p. 3-4.
- [2] Köpnick, H., Schmidt, M., Brüggling, W., Rüter, J., & Kaminsky, W. (2000). *Polyesters. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. doi:10.1002/14356007.a21_227
- [3] Sang, T., Wallis, C. J., Hill, G., & J. P. Britovsek, G. (2020). *Polyethylene Terephthalate Degradation under Natural and Accelerated Weathering Conditions. European Polymer Journal*, 109873. doi:10.1016/j.eurpolymj.2020.109873
- [4] Langer, E., Bortel, K., Waskiewicz, S., & Lenartowicz-Klik, M. (2020). *Methods of PET Recycling. Plasticizers Derived from Post-Consumer PET*, 127–171. doi:10.1016/b978-0-323-46200-6.00005-2
- [5] Nisticò, R. (2020). *Polyethylene terephthalate (PET) in the packaging industry. Polymer Testing*, 106707. doi:10.1016/j.polymertesting.2020.106707
- [6] Sheel, A., & Pant, D. (2019). 'Chemical Depolymerization of PET Bottles via Glycolysis.' in S Thomas, A Rane, K Kanny, Abitha V.K., M. G. Thomas (eds), *Recycling of Polyethylene Terephthalate Bottles*, William Andrew Publishing, pp 61-84. doi: 10.1016/B978-0-12-811361-5.00004-3
- [7] Chaudhary, S., Surekha, P., Kumar, D., Rajagopal, C., & Roy, P. K. (2013). Microwave assisted glycolysis of poly(ethylene terephthalate) for preparation of polyester polyols. *Journal of Applied Polymer Science*, 129(5), 2779–2788. doi:10.1002/app.38970

ОРГАНИЧНО-НЕОРГАНИЧНИ ХИБРИДИ НА ОСНОВАТА НА УРЕЯСИЛИКАТИ – СИНТЕЗ И АСПЕКТИ НА ПРИЛОЖЕНИЕ

Жана Ганчева^{1,2}, В. Илчева¹, В. Боев¹, Т. Петкова¹

¹ *Българска академия на науките, Институт по електрохимия и енергийни системи
“Акад. Евгени Будевски”, ул. Акад. Г. Бончев, бл. 10, 1113 София
e-mail: zhani_999@abv.bg
victor.boev@iees.bas.bg*

² *Химикотехнологичен и металургичен университет, бул. Климент Охридски 8,
1756 София*

Получени са органично-неорганични хибридни материали от два уреясиликатни мономера (прекурсори), намиращи се в различни обемни съотношения помежду си. Чрез зол-гел технология, от получените прекурсори са формирани серия от образци, чиято структура на нанониво е изградена от наноклъстерни силоксанови групировки, свързани помежду си с гъвкави полиоксиетиленови/полиоксипропиленови полимерни вериги.

Синтезът на първия мономер е осъществен в резултат на реакция между 3-изоцианатпропил триетоксисилан (ICPTES) и полиоксиетилен/полиоксипропилен амин (О,О'-бис(2-аминопропил)-полипропилен гликол-блок-полиетилен гликол-блок-полипропилен гликол-500 (Jeffamine ED-600)) при молно съотношение ICPTES/Jeffamine=2, а вторият прекурсор е получен чрез взаимодействие на два модифицирани силициеви алкоксида: 3-изоцианатпропил триетоксисилан и аминопропилтриетоксисилан (APTES), при съотношение ICPTES/APTES=1.

Получените образци са използвани за инкорпориране на две неорганични киселини като източник на протони (H_3PO_4 , $HClO_4$), с оглед потенциално приложение на получените хибриди за изработка на полимерни протонпроводящи мембрани за горивни клетки, работещи в нискотемпературния диапазон.

Материалите са охарактеризирани с помощта на рентгенова дифракция (XRD), инфрачервена спектроскопия в средния диапазон (FTIR) и сканираща електронна микроскопия (SEM).

Установено е, че структурата и морфологията на повърхността на изследваните образци се влияе не само от състава на мономера, но и от вида на имобилизираната в тях киселина. Идентифицираното наличие на ОН и Н-О-Н връзки в структурата на материалите, получени от Прекурсор 1, е предпоставка за добра йонна проводимост.

НОВИ ЛЕКАРСТВЕНИ НОСИТЕЛИ ЗА ТИМОЛОЛ МАЛЕАТ НА БАЗАТА НА ПОЛИ(СУЛФОБЕТАИН МЕТАКРИЛАТ) И ХИТОЗАН

Д. Николова¹, Й. Тупарова¹, Л. Христов², Х. Цачев³, Е. Василева¹

¹Лаборатория по структура и свойства на полимерите, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, София 1164, България, бул. Джеймс Баучер №1, dnikolova@chem.uni-sofia.bg

²Лаборатория по водоразтворими полимери, полиелектролити и биополимери, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, София 1164, България, бул. Джеймс Баучер №1

³Лаборатория по технология на лекарствените форми и биофармация, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, София 1164, България, бул. Джеймс Баучер №1

Глаукомата е едно от най-често срещаните очни заболявания в световен мащаб, водещо до прогресивно намаляване на зрението на пациента, което може да доведе до пълна слепота. Конвенционалното третиране на заболяването е с неселективния бета блокер тимолол малеат (ТМ), който се внася в окото под формата на капки за очи. Този метод, обаче, не осигурява достатъчна бионаличност на лекарственото вещество (обикновено под 5%), поради краткото време на контакт между лекарствения носител и очната повърхност. Друг недостатък е разреждането на лекарственото вещество и отмиването на част от него от сълзната течност. Така, конвенционалните методи за лекарствено доставяне на тимолол малеат не могат да осигурят ефективното му терапевтично действие, което определя необходимостта от разработването на нови, подобрени лекарство-доставящи системи.

Целта на настоящата работа е да бъдат създадени нови лекарствени носители на тимолол малеат на базата на поли(сулфобетаин метакрилат) (ПСБ) и хитозан. ПСБ е биосъвместим цвитерйонен полимер, докато за хитозана е известно, че подобрява пермеабилитета на роговицата. Така, съчетаването на двата полимера в нов полимерен носител се очаква да доведе до по-продължителен престой на лекарственото вещество в окото, като по този начин се увеличи и ефективността на терапията с него. Получени бяха наночастици от ПСБ и хитозан, като те бяха охарактеризирани с динамично лазерно светоразсейване и зета потенциал. Определена бе степента на лекарствено натоварване и бе изследвано взаимодействието на лекарственото вещество с полимерния носител. Получените нови лекарствени носители показват потенциал като ефективни лекарствени носители на тимолол малеат.

Благодарности: Това изследване се осъществява с финансовата подкрепа на Фонд за научни изследвания на СУ“Св. Климент Охридски“, Договор No 80-10-72/25.03.2021.

СЕКЦИЯ ХИМИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ И ИНЖЕНЕРНА ХИМИЯ

Памела Петрова, ФХФ - СУ

Десислава Глушкова, ФХФ - СУ

Анита Бисерова, ФХФ - СУ

Кръстина Цветкова, ФХФ - СУ

Мартин Пантов, ФХФ - СУ

Ралица Узунова, ФХФ - СУ

Татяна Славова, ФХФ - СУ

Васил Георгиев, ФХФ - СУ

Тюркиян Арнаудова, ФХФ - СУ

Вяра Йорданова, ФХФ - СУ

Росена Крушовалиева, ФХФ - СУ

Владимир Кътев, ФХФ - СУ

Владимир Петков, ФХФ - СУ

Делян Кръстев, ФХФ - СУ

ЕФЕКТ НА NaCl ВЪРХУ РАСТЕЖА НА АНИОННИ/ ЦВИТЕРЙОННИ МИЦЕЛИ: РЕОЛОГИЧНИ ЗАВИСИМОСТИ

Памела К. Петрова¹, Лидия М. Димитрова¹, Светослав Е. Аначков¹

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра инженерна химия и фармацевтично инженерство, бул. „Джеймс Баучър“ № 1, София 1164
pp@lcpe.uni-sofia.bg

Реологията на смеси от анионни и цвистерйонни ПАВ зависи главно от общата им концентрация, c_{tot} , общата концентрация на противойоните, c_{Na} , и тегловната част, w_S , на анионното ПАВ. Тези фактори са взаимосвързани и поради това е трудно да се разделят техните ефекти върху растежа на смесените мицели.

В нашето изследване, приготвихме разтвори на ПАВ, съдържащи натриев лаурил-етерсулфат с една етилен оксидна група (SLES-1EO; анионен), кокамидопропилбетаин (CAPB; цвистерйонен) и NaCl. Свойствата на мицеларните разтвори определихме чрез реологични измервания в режим на стационарна и осцилираща деформация, както и чрез оптична микроскопия в поляризирана светлина.

Установихме, че вискозитетът при нулева деформация η_0 нараства с $c_{tot}^{1.80}$, еластичността G_0 нараства с $c_{tot}^{1.55}$, и релаксационното време τ_R нараства с $c_{tot}^{0.25}$. Също така, η_0 и τ_R минават през максимуми като функция от c_{Na} , чиито позиции не зависят от c_{tot} . От друга страна, G_0 нараства монотонно с c_{Na} и след максимума във вискозитета излиза на плато. Освен това, η_0 и τ_R намаляват с увеличаване на w_S , поради по-силното отблъскване между главите в мицелите. А пък, G_0 расте слабо с увеличаване на w_S , тъй като позаредените мицели се отблъскват по-силно помежду си. Използвайки тези реологични зависимости, построихме универсални криви, които помагат за бързо и насочено оптимизиране на продуктите за лична хигиена.

ОБРАЗУВАНЕ НА МЕТАСТАБИЛНИ РОТАТОРНИ ФАЗИ В ХЕКСАДЕКАНОВИ КАПКИ

Десислава Глушкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков

СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, ул. Марин Русев №4, 1164 София, България, dsg@lcpe.uni-sofia.bg

В предходни изследвания бе показано, че емулсионни капки от алкани могат да претърпят спонтанни промени във формата си при охлаждане, превръщайки се в частици с разнообразни правилни несферични форми. Тези деформации са съпътствани с нарастване на площта на капките при ненулево междуфазово напрежение на системата. Предложена бе хипотезата, че повишението в междуфазовата енергия се компенсира от подреждането на алканови молекули в мултислоеве от пластична ротаторна фаза, разположена по повърхността на флуидните частици.^{1,2}

Целта на настоящето изследване е да се проследят промените в молекулното подреждане в микрометрични хексадеканови ($C_{16}H_{34}$) емулсионни капки. Комбинирайки структурни данни, получени при малки (SAXS) и големи (WAXS) ъгли на разсейване на рентгенови лъчи от синхротронен източник, с микроскопски наблюдения и измервания чрез диференциална сканираща калориметрия, заключихме, че ротаторни фази се формират само в емулсии на хексадекан, в които при охлаждане се индуцират спонтанни промени във формата. В една от изследваните системи наблюдавахме обемно пластифициране на емулсионни капки (образуване на обемна ротаторна фаза), а в друга - образуването на частици с дебели външни обвивки от ротаторна фаза и течна компонента от хексадекан във вътрешността. Чрез SAXS измерванията детектирахме две различни по структура метастабилни ротаторни фази, съществуващи в температурен интервал преди кристализацията на алкана, и определихме температурите им на топене.

1. Denkov et al, *Nature* **2015**, 528, 392-395.
2. Cholakova et al, *Adv. Colloid Interface Sci.* **2016**, 235, 90-107.

Изследването е финансирано от МОН по национална научна програма „ВИХРЕН“, проект ROTA-Active (KP-06-DV-4/16.12.2019).

SAXS/ WAXS измерванията са финансирани по проекта CALIPSOplus (Grant Agreement 730872) от Европейската рамкова програма за изследвания и иновации HORIZON 2020 (проект 20202101).

ИЗСЛЕДВАНЕ СТАБИЛНОСТТА НА ФОРМИТЕ НА НЕСФЕРИЧНИ АЛКАНОВИ КАПКИ

Анита Бисерова, Кръстина Цветкова, Десислава Глушкова
Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков

*СУ “Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, ул. Марин Русев № 4, 1164 София, България,
ab@lcpe.uni-sofia.bg

Обикновено микрометричните емулсионни капки са със сферична форма, при която повърхността им и съответната повърхностна енергия са минимални. В работата на Denkov et al. [1] е показано, че алканови капки, стабилизирани с подходящи повърхностно-активни вещества (ПАВ), могат да променят формата си при охлаждане с постоянна скорост. Основните етапи, през които преминават капките, са сфера → правилни или неправилни обемни многостени → плоски призматични многостени (шестоъгълни, четириъгълни и триъгълни) → пръчковидни форми и тънки нишки.

От проведените досега изследвания остава неясно дали тези форми са термодинамично стабилни. Поради тази причина, в настоящето изследване проведохме моделни експерименти, при които деформирахме капките до определена форма, след което задържахме постоянна температурата за продължителен период от време и наблюдавахме поведението на несферичните флуидни частици. Получените резултати можем да обобщим по следния начин: (1) Стабилността на несферичните частици зависи от вида на ПАВ, използван за стабилизиране на емулсията. В емулсии, стабилизирани с чисти ПАВ, при задържане на постоянна температура, формите се запазваха постоянни. В емулсиите, стабилизирани с ПАВ с техническа чистота, наблюдавахме продължаващо развитие на формите по еволюционната схема, поради възможността за промяна на състава на адсорбционния слой; (2) Скоростта, с която се осъществява преход от една в друга форма при постоянна температура, зависи от преохлаждането на системата – при по-големи преохлаждания наблюдавахме по-бързи преходи във формата; (3) При експериментите със задържане на температурата наблюдавахме допълнителни форми, които не се образуват при експериментите с постоянна скорост на охлаждане.

1. N. Denkov et al., *Nature* **2015**, 528, 392-395.

Изследването е финансирано от ФНИ, чрез процедурата за предоставяне на национално съфинансиране за участие в Европейската програма за сътрудничество в областта на научните изследвания и технологиите COST Chemobionics 17120 (проект № КП-06-COST-10).

РЕОЛОГИЧНИ СВОЙСТВА НА РОТАТОРНИ ФАЗИ ОТ ЛИНЕЙНИ АЛКАНИ

Кръстина Цветкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков

*СУ “Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация
Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, ул. Марин Русев № 4,
1164 София, България, *kt@lcpce.uni-sofia.bg*

От литературата е известно, че най-простите органични съединения, алканите, проявяват нетривиално поведение при охлаждане от стопилка.^{1,2} Между напълно не-подреденото им течно агрегатно състояние и напълно подреденото – кристално, съществуват междинни ротаторни фази. Молекулите, подредени в ротаторна фаза образуват слоеста структура, като същевременно запазват известна ротационна свобода, т.е. могат да се въртят/осцилират около надлъжната си ос. Спецификите на ротаторните фази са предпоставка за възникването на комплексни виско-еластични свойства, които, обаче, към момента остават неизследвани. Същевременно, именно реологичните свойства на ротаторните фази имат основно значение за характеристиките на различни козметични продукти (вазелин, кремове), лубриканти в индустрията и процеси, наблюдавани в живата природа.²

В настоящото изследване, разработихме реологична процедура, която ни позволява да детектираме протичането на фазови преходи в алкани, както и да изследваме виско-еластичните свойства на ротаторни и кристални фази. Проведохме измервания с алкани с дължина между 15 и 28 C-атома, като получените резултати бихме могли да обобщим по следния начин: (1) Модулът на съхранение (G') и модулът на загубите (G''), измерени за различните ротаторни фази при деформация на прехлъзване, са $\approx 0.5 - 3$ МРа и $\approx 0.2 - 0.4$ МРа съответно; (2) Специфичната стойност на G' и G'' се определя не от типа на ротаторната/кристалната фаза, а от преохлаждането на системата; (3) При по-късоверижните алкани ($C_{15}H_{32}$ и $C_{17}H_{36}$), притежаващи малки и мобилни молекули, преходът между ротаторна и кристална фаза се осъществява с плавно повишение на модула на еластичност и модула на загубите, докато при по-дълговерижните алкани се наблюдава стъпаловидно повишение на стойностите на модулите.

1. E. Sirota, H. King, D. Singer, H. Shao, J. Chem. Phys. **1993**, 98, 5809-5824.
2. D. Cholakova, N. Denkov. Adv. Colloid Interface Sci. **2019**, 269, 7-42.

Изследването е финансирано от ФНИ, чрез процедурата за предоставяне на национално съфинансиране за участие в Европейската програма за сътрудничество в областта на научните изследвания и технологиите COST Chemobrionics 17120 (проект № КП-06-COST-10).

СПОНТАННО НАНОФРАГМЕНТИРАНЕ И ПОЛУЧАВАНЕ НА ДВУКРАТНИ ЕМУЛСИИ ОТ МОДЕЛНИ ТРИГЛИЦЕРИДНИ СМЕСИ

Мартин Пантов*, Десислава Глушкова, Диана Чолакова,
Славка Чолакова, Николай Денков

СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, ул. Марин Русев №4, 1164 София, България
**mer@lcre.uni-sofia.bg*

В предишни изследвания^{1,2} е показано, че полиморфното превръщане от α в β фаза при триглицеридни капки може да доведе до разкъсването на емулсионните капки и получаване на субмикронни частици при охлаждане и/или нагряване на системата. В част от системите е наблюдавано образуването на двукратни емулсии от тип вода-в-масло-във-вода.

Целта на настоящето изследване е да разберем как съставът на емулсионните капки (смеси от триглицериди) влияе върху наблюдаваните процеси. За целта проведохме експерименти с диференциална сканираща калориметрия (DSC), рентгенова дифракция (SAXS/WAXS), оптична микроскопия и измервания на трифазни контактни ъгли.

Получените резултати показват, че при всички изследвани смесени системи е възможно осъществяването на ефективно нанофрагментиране и формиране на двукратни емулсии при подходящо подбрани температурни протоколи и смеси от повърхностно активни вещества. При експериментите със смеси от триглицериди показахме, че е възможен преход между двата гранични типа поведение (нанофрагментиране и получаване на двукратни емулсионни капки) за една и съща по химичен състав система. Този преход може да бъде контролиран чрез промяна на: (1) Температурния протокол – скоростта на охлаждане и нагряване, (2) Концентрацията на маслоразтворимо повърхностно-активно вещество, (3) Фазата, в която се добавя маслоразтворимото вещество.

1. Cholakova et al, *ACS Nano*, 2020, 14, 8594-8604
2. Cholakova et al, *Langmuir*, 2021, [10.1021/acs.langmuir.0c02967](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.0c02967)

Изследването е финансирано от МОН по национална научна програма „ВИХРЕН“, проект ROTA-Active (KP-06-DV-4/16.12.2019).

Част от изследванията са проведени на апарати, закупени по проект BG05M2OP001-1.002-0012, финансиран от ОП НОИР, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

АДСОРБЦИЯ НА ЛЕТЛИВИ АМФИФИЛИ НА МЕЖДУФАЗОВА ГРАНИЦА И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕТО ИМ С ЙОННО ПОВЪРХНОСТНО АКТИВНО ВЕЩЕСТВО

Ралица Узунова, Румяна Станимирова, Теодор Гърков, Красимир Данов

Катедра “Инженерна химия и фармацевтично инженерство” Факултет по химия и фармация, СУ “Св. Климент Охридски” 1164 София бул. Джеймс Баучър 1, ru@lcre.uni-sofia.bg

В това изследване са използвани три летливи амфифилни вещества – линалол, бензил ацетат, цитронелол, както и нискомолекулното анионно повърхностно активно вещество, натриев додецил сулфат (SDS). Те имат свойството да се адсорбират на границата вода/въздух и вода/масло, съответно да намаляват междуфазовото напрежение и да променят повърхностната реология. Летливите амфифилни вещества имат широко индустриално приложение и се използват като: ароматизатори в козметиката и модификатори на вискозитета на формулировките; съставки за мастилено-струен печат, биосензорни и термо-сензорни електронни устройства и др.

Измерено е динамичното повърхностно напрежение на индивидуалните компоненти, както и на смес от летливо амфифилно вещество и SDS, с помощта на метода на максималното налягане в мехурче. Определени са равновесните стойности на повърхностното напрежение, с помощта на асимптотичен подход. Построени са изотермите на съответните системи и теоретично са определени параметрите на веществата (изключена площ на молекула, стандартна свободна енергия на адсорбция, адсорбционна константа, параметър на латерално взаимодействие), използвайки модела на Ван дер Ваалс за еднокомпонентни системи и за многокомпонентни адсорбционни слоеве. Проверена е валидността на получените резултати чрез провеждане на независими експерименти [1].

References:

[1] K. D. Danov, T. D. Gurkov, R. D. Stanimirova, R. I. Uzunova, “Kinetics of transfer of volatile amphiphiles (fragrances) from vapors to aqueous drops and vice versa: Interplay of diffusion and barrier mechanisms” – under review

Благодарности: Тази научна работа е финансирана по проект № ДО 02/4 от 2018 г., ФНИ–МОН.

КАПСУЛИРАНЕ НА МАСЛА И ПАРФЮМИ В КОЛОИДОЗОМИ ИЗГРАДЕНИ ОТ НАНОЧАСТИЦИ SiO_2 , ПОЛИМЕРИ И СЪРФАКТАНТИ: ЕФЕКТ ОТ РАЗМЕР НА ЧАСТИЦИТЕ

Татяна Славова, Гергана Радулова, Красимир Данов

*Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство,
Софийски университет "Св. Климент Охридски", 1164 София, България,
tatiana_slavova@lcpce.uni-sofia.bg*

Масла и аромати могат да бъдат капсулирани, като се използва композитна обвивка от наночастици от SiO_2 , полимер, повърхностно-активно вещество (ПАВ) – калиев олеат и неорганичен електролит (NaCl). В нашето изследване [1], образувахме микрокапсули, като за матрица използвахме емулсионни капки покрити с частици (Пикерингова емулсия). ПАВ се адсорбира върху повърхността на наночастиците, това води до обратимото им хидрофобизиране и адсорбиране на границата масло/вода. Външният слой от обвивката на капсулите представлява слой от омержен полимер. Процедурата по капсулиране се състои от една стъпка и включва ултразвукова хомогенизация на всички компоненти заедно. Получените капсули са със среден радиус в диапазона 2-11 μm . Размерът на капсулите (по порядък и тенденция за промяна) следва закона на ограничената коалесценция (limited coalescence) по отношение на зависимостта от размера и концентрацията на наночастиците. Композитната структура на обвивките също зависи от концентрацията на добавените полимер и сърфактант (ПАВ). Получените капсули остават стабилни след промиване с чиста вода с рН в интервала от 3 до 10. Въпреки това, при диспергиране във вода с рН > 11, капсулите се разрушават и изпускат капсулираното масло, т.е. чрез промяната на рН може да се променя и стабилността на капсулите. Чрез оптимизираната формулировка от наночастици от SiO_2 , полимер, калиев олеат и NaCl , успяхме да капсулираме различни масла и парфюми – като лимонен, слънчогледово масло, бензил ацетат и цитронелол. Получената информация за ефекта от различните фактори върху свойствата на капсулите може да бъде използвана във всяка сфера, в която е нужно обратимо капсулиране на маслени вещества.

[1] T.G. Slavova, G.M. Radulova, P.A. Kralchevsky, K.D. Danov, *Colloids and Surf. A* 606 (2020) 125558.

ВЛИЯНИЕ НА ПОВЪРХНОСТНИТЕ СВОЙСТВА НА СМЕСИ ОТ ПАВ ВЪРХУ АНТИПЕНИТЕЛНОТО ДЕЙСТВИЕ НА СМЕСЕНИ АНТИПЕНИТЕЛИ

Васил Георгиев, Надя Политова-Бринкова, Моника Христова,
Славка Чолакова, Николай Денков

*Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство,
Факултет по Химия и Фармация, СУ "Св. Климент Охридски"
vg@lcpce.uni-sofia.bg*

Смеси от повърхностно-активни вещества (ПАВ), се използват в редица приложения поради добрите им пеностабилизиращи свойства. В някои случаи се налага и използването на антипенителни добавки (АП) за контролиране на пенливостта или за получаване на подходящ пенен профил при даденото приложение. Известно е, че най-ефективни в разрушаването на пяна са смесените АП, съдържащи силиконово масло и хидрофобни частици поради синергизма в действието на отделните компоненти [1].

В настоящата работа [2] изследвахме антипенителната активност на смес от силиконово масло и силикатни частици върху пенливостта на смеси от ПАВ. За целта охарактеризирахме повърхностните свойства на смеси от анионни (алкил бензен сулфонат, LAS; натриев лаурил етер сулфат, SLES и натриев лаурил сулфат, SDS), нейонни (етоксилиран алкохол, IO7) и цвистерйонни (кокоамидо пропил бетаин, CAPB) ПАВ, както и такива изградени от природни ПАВ с висок повърхностен модул (сапонин, QD). Изследвахме и влиянието на мастни киселини, добавяни като ко-сърфактанти.

Установихме, че съществува корелация между началната антипенителна активност и площта на молекула в адсорбционния слой от ПАВ, като в системите с поплътни адсорбционни слоеве (с по-малка площ на молекула) антипенителят не успява да разруши пяната, докато той е много активен, ако образуваният адсорбционен слой е с по-ниска плътност.

В присъствието на мастни киселини, активността на антипенителя се определя от условията на средата. При ниско рН ≈ 6 , молекулите на киселината са нейонизирани, което води до образуване на кондензиран адсорбционен слой, предотвратяващ АП действие, докато при рН ≈ 8 , мастните киселини са йонизирани и образуват калциеви сапуни, които сами по себе си проявяват антипенителна активност.

1. N. Denkov et al., *Adv. Colloid Interface Sci.* 206 (2014) 57.
2. N. Politova-Brinkova et al., *Colloids Surf. A* 610 (2021) 125747.

ПЕНООБРАЗУВАНЕ И СТАБИЛНОСТ НА НЕВОДНИ ПЕНИ

Тюркиян Арнаудова¹, Надя Политова¹, Златина Митринова¹,
Славка Чолакова¹, Николай Денков¹, David Gowney², Greg Miranda³

¹ *Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, СУ*

² *Lubrizol Limited, Belper, Derbyshire, UK*

³ *The Lubrizol Corporation, a Berkshire Hathaway Company, Wickliffe, Ohio, USA*
ta@lcpce.uni-sofia.bg

Смазочните масла намират приложение в множество индустрии. Освен основното масло, те съдържат и различни модифициращи компоненти (добавки), които осигуряват целите на приложението им. Някои от използваните добавки имат пеностабилизираща способност, което причинява сериозни проблеми при работата на двигателите и скоростните кутии, като окислително и термично разграждане на маслото и възпрепятстване на топлопреноса в участъците с интензивно триене.

Неводните пени са по-трудни за анализиране в сравнение с водните, поради пониските междуфазови напрежения на границата масло-въздух, което води до слаба адсорбция и неефективна стабилизация на пените от класическите повърхностно-активните вещества. Също така, при неводните пени отсъства електростатично стабилизирание на пенните филми, което означава, че други явления и фактори, като стерични взаимодействия и повърхностна реология, са важни за стабилизирането на тези пени.

Целта на настоящото изследване е да се анализира ефекта на няколко добавки върху пенообразуващите свойства на три моделни минерални масла - хексадекан (HEX), смеси на въгледороди с нисък вискозитет (LO) и смеси с висок вискозитет (HO). Изследвахме процеса на пенообразуване и стабилността на получените пени при няколко температури и проведохме моделни експерименти с единични пенни филми. Установихме, че пенообразуването нараства в следния ред: HEX < LO < HO, което се обяснява с два ефекта: (1) по-нисък вискозитет на HEX спрямо LO и HO, което води до по-бързото изтъняване на пенните филми от хексадекан и (2) наличието на дълговерижни алкани в LO и HO, които създават стерично отблъскване между повърхностите на пенните филми, както се вижда от моделните експерименти. Две от тестваните добавки (A1 и A2) повишават съществено пенообразуването и стабилността на пените от LO и HO, без да променят пенообразуването и стабилността на пяната от HEX. При всички изследвани системи се наблюдава добра корелация между стабилността на пените и стабилността на съответните вертикални пенни филми.

НАРАСТВАНЕ НА МЕХУРЧЕТА В ДИСПЕРСИИ НА ПОЛИОЛИ ПРИ ТЯХНОТО НАГРЯВАНЕ

В. Йорданова, И. Лесов, С. Чолакова, Н. Денков

*Катедра Инженерна химия и Фармацевтично Инженерство,
Факултет по Химия и Фармация, СУ „Св. Климент Охридски“
Джеймс Баучер 1, 1164 София
E-mail: vii@lcre.uni-sofia.bg*

Производството на полиизоциануратни пени се основава на химичната реакция на метилен дифенил 4,4-диизоцианат (MDI) с полиестер- или полиетер-модифицирани полиоли. Реакцията на полимеризация е силно екзотермична, което често се използва за контрол на плътността на материалите и размера на порите в тях, а те от своя страна предопределят топлопроводността на крайните порьозни материали. Поради липсата на систематични изследвания в областта обаче, контролът над размера на порите и плътността на материалите често се определя по метода „проба-грешка“, като се добавят вещества преминаващи фазов преход течност-газ при температура близка до стайната. Тези вещества се наричат в техническата литература „blowing agents“, а като пример могат да се посочат късоверижните алкани.

Основната цел на настоящото изследване е да се направи оценка на ефектите на температурата и концентрацията на циклопентан върху скоростта на нарастване на мехурчетата в дисперсии на полиоли със силиконови повърхностно-активни вещества. За да моделираме процеса на нарастване на мехурчетата при екзотермичната полимеризация, без наличието на еластични или пластични ефекти, подготвихме дисперсии на циклопентан-в-полиол без MDI. После с помощта на оптичен микроскоп наблюдавахме растежа на мехурчетата с времето при нагряването им в моделна клетка.

В резултат на направените изследвания установихме, че скоростта на нарастване на мехурчетата при оптимална концентрация на циклопентан (около 17 vol%) може да нарасне близо 10 000 пъти при промяна на температурата от 25 на 55°C (сравнено със системите без циклопентан), следвайки зависимост близка до експоненциалната.

ЛИПОЗОМИ КАТО СИСТЕМА ЗА ПРИЛАГАНЕ НА ЛЕКАРСТВЕНИ ВЕЩЕСТВА В ОЧИТЕ

Росена Росенова Крушовалиева

*Катедра по фармацевтична и приложна органична химия,
rosenakrushovalieva@gmail.com*

Човешкото око е сетивен орган със сложна структура и организация, чрез който ние възприемаме около 80% от информацията за външния свят [1]. Едно от заболяванията, които засягат очите е глаукома, при което се уврежда главата на зрителния нерв и това води до прогресивна загуба на зрение. Конвенционалните лекарствени форми имат своите предимства, но и недостатъци. За да бъдат преодолени недостатъците им, научните изследователи насочват усилията си в разработване на нови лекарствени форми за доставяне на биологично активни молекули в очите [2]. Съвременен носител са липидните наночастици, в частност липозомите. Липозомите представляват сферични везикули, изградени от един или няколко липидни бислоеве, които заграждат хидрофилна сърцевина. Уникалната им структура позволява в липозомите да бъдат натоварени хидрофилни и хидрофобни лекарства, а също и големи молекули като протеини и генни секвенции. Размерът на липозомите е от около 20 nm до няколко μm . В зависимост от големината им и от броя на бислоеве се класифицират като SUV (small unilamellar vesicles), LUV (large unilamellar vesicles), GUV (giant unilamellar vesicles), OLV (oligolamellar vesicles), MLV (multilamellar vesicles). При приготвянето на частиците се прилагат разнообразни техники – най-често използван е методът хидратиране на тънък липиден филм. Използват се и други техники като метод с изпарение и обръщане на фазите, метод с инжектиране на разтворител и някои от тях могат да бъдат мащабиращи [3]. Веднага след получаването е необходимо липозомите да бъдат охарактеризирани по отношение на размер, брой слоеве, Z-потенциал, като се използват различни видове микроскопи, хроматографски и спектроскопски методи за анализ. В научната литература са посочени редица изследвания, които показват много по-добри терапевтични резултати, когато се използват липозоми като лекарствен носител, в сравнение с референтния продукт – удължено време за контакт с очната повърхност, намаляване на ефективната концентрация на лекарството, намаляване на нежеланите лекарствени реакции, увеличаване на продължителността на действие на лекарството, намалява се честотата на въвеждане, което неминуемо ще повиши придържането на пациента към терапията [4]. Важен параметър на липозомите като лекарство доставяща система високо съотношение лекарство/липид, както и ефективността на натоварване [5]. И макар да има доста проведени изследвания в тази насока, до създаването на липозомен офталмологичен лекарствен продукт, който е качествен, ефикасен и безопасен предстои да бъде изминат дълъг път.

Цитати:

1. Barry D. Barry D. Kels, MD, Andrzej Grzybowski, MD, PhD, Jane M. Grant-Kels, MD – Human ocular anatomy – Elsevier, 2015
2. A. Laouini, C. Jaafar-Maalej, I. Limayem-Blouza, S. Sfar, C. Charcosset, and H. Fessi - Preparation, Characterization and Applications of Liposomes: State of the Art
3. Renu Agarwal, Igor Iezhitsa, Puneet Agarwal, Nurul Alimah Abdul Nasir, Norhafiza Razali, Renad Alyautdin, and Nafeeza Mohd Ismail Liposomes in topical ophthalmic drug delivery: an update
4. Medhat W. Shafaaa,b,*, Neveen M. Sabrac, and Rehab A. Fouada - The extended ocular hypotensive effect of positive liposomal cholesterol bound timolol maleate in glaucomatous rabbits
5. S. B. KULKARNI, G. V. BETAGERI" and M. SINGH - Factors affecting microencapsulation of drugs in liposomes

МЕХАНИЗМИ НА СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ НА ЛЕКАРСТВА ОТ ПОЛЯРНИ ЛИПИДИ В МОДЕЛ НА СТОМАШНО-ЧРЕВНИЯ ТРАКТ

Владимир Кътев, Захари Винаров, Славка Чолакова

*Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски”,
Катедра „Инженерна Химия”, 1164 София, бул. Джеймс Баучър 1,
vk@lcp.uni-sofia.bg*

Въпреки широкото използване на липидните помощни вещества в разработването на перорални формулировки, все още липсват ясни правила за техния подбор. Целта на настоящето изследване е определим какво е влиянието на хидрофобната опашка и хидрофилната глава на често използвани полярни липиди върху солубилизационния капацитет на жлъчните киселини при условия близки до тези в стомашно-чревния тракт. За целта изследвахме влиянието на 13 фосфолипида, 11 мастни киселини и 2 моноглицерида върху солубилизацията на фенофибрат, даназол и прогестерон в *in-vitro* модел, симулиращ условията в стомашно-чревния тракт. Установихме, че за да се увеличи солубилизацията на лекарство е необходимо добавеният полярен липид да образува смесени мицели с жлъчните киселини, което се постига, ако са изпълнени едновременно следните условия: (1) полярният липид е добавен в концентрация по-висока от критичната концентрация на мицелообразуване, ККМ и (2) Температура му на топене да е под 37 °С.

Полярни липиди с наситена верига с 16 и 18 С атома в нея имат значително по-високи температури на топене от 37 °С и не повлияват солубилизационния капацитет на жлъчните киселини, докато при същия брой атоми във въглеродородната верига, но при наличие на двойни връзки в нея, добавеният полярен липид в по-висока концентрация от ККМ води до увеличаване на солубилизационния капацитет на смесените мицели до повече от 10 пъти.

Хидрофилната глава на полярния липид също оказва съществено влияние върху солубилизационния капацитет на жлъчните киселини, ефективността на полярните липиди се променя в реда [холинови фосфолипиди] > [моноглицериди] > [мастни киселини].

Работата е финансирана от ФНИ по проект ДКОСТ 01/12 от 23.11.2018.

V. Katev, Z. Vinarov, S. Tcholakova, “Mechanisms of Drug Solubilization by Polar Lipids in Biorelevant Media”, *Eur. J. Pharm. Sci.* 159 (2021) 105733; doi: 10.1016/j.ejps.2021.105733

ИЗСЛЕДВАНЕ НА РАЗТВОРИМОСТТА НА АМОРФНИ ТВЪРДИ ДИСПЕРСИИ НА ГЛИБЕНКЛАМИД В IN-VITRO МОДЕЛ НА СТОМАШНО-ЧРЕВНИЯ ТРАКТ

Владимир Петков, Соня Цибранска, Захари Винаров, Славка Чолакова

*Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски”,
Катедра „Инженерна Химия”, 1164 София, бул. Джеймс Баучър 1,
vdp@lcpe.uni-sofia.bg, st@lcpe.uni-sofia.bg, zv@lcpe.uni-sofia.bg, sc@lcpe.uni-sofia.bg*

Голяма част от новите лекарствени вещества се характеризират с ниска разтворимост във вода, което затруднява включването им в конвенционални лекарствени форми. Един от подходите за увеличаване на тяхната орална бионаличност е включването им в аморфни твърди дисперсии с помощта на полимери. Използваният в аморфните дисперсии полимер, изпълнява две основни функции: удължава стабилността на лекарственото вещество в аморфна форма и позволява получаването на метастабилен преситен разтвор на лекарство след освобождаването му в стомашно-чревния тракт.

Целта на настоящето изследване е да се определи разтворимостта на глибенкламид в in-vitro модел на стомашно-чревния тракт, който предварително е включен в аморфни твърди дисперсии и да се изясни способността на различни полимери, да инхибират преципитацията на глибенкламид в преситения разтвор. За целта изследвахме аморфни твърди дисперсии на глибенкламид, с НРС (с висока и ниска средна молекулна маса) и Poloxamer 407. Установихме, че включването на глибенкламид в аморфни твърди дисперсии, значително подобряват разтворимостта му в условия близки до тези в стомашно-чревния тракт. Системите, съдържащи НРС, се характеризират с по-висока разтворимост и възможност на полимера да стабилизира получения преситен разтвор, като системите съдържащи НРС с ниска средна молекулна маса, се отличават с бързо освобождаване на глибенкламид от матрицата, но не успяват да стабилизират преситения разтвор за дълго време. Системите съдържащи НРС с висока молекулна маса, имат по-бавно освобождаване на глибенкламид, но полимерът успява да стабилизира преситения разтвор за по-дълго време.

Работата на В.П. по тази задача е финансирана от МОН по национална научна програма „Млади учени и постдокторанти“.

Част от изследванията са проведени на апарати, закупени по проект BG05M2OP001-1.002-0012, финансиран от ОП НОИР съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

IN VITRO МОДЕЛ ЗА ОПРЕДЕЛЯНЕ РАЗПРЕДЕЛЕНИЕТО НА ЛЕКАРСТВЕНИ ПРОДУКТИ МЕЖДУ МОДЕЛНА ПЛАЗМА И ЛИПИДНА ЕМУЛСИЯ

Делян Кръстев, Захари Винаров, Васил Атанасов, Славка Чолакова, Николай Денков

СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, ул. Марин Русев №4, 1164 София, България, dk@lcpce.uni-sofia.bg

В практиката липидните емулсии за интравенозно парентерално хранене се използват и в спешната медицина като неспецифичен антидот при остри отравяния с някои лекарствени продукти (ЛП). Причините за този антидотен ефект не са изцяло изяснени. Медикаментите, при които венозно се прилага емулсия Intralipid 20 (Fresenius Kabi) като антидотно средство досега, са определени емпирично. Наблюдава се тенденция, че при по-хидрофобните ЛП терапията е по-ефикасна, в сравнение с по-хидрофилните ЛП.

Целта на настоящото изследване е да се определят факторите, които обуславят трансфера на лекарствените молекули от кръвната плазма към липидните капки. Това ще позволи рационализирането на прилагането на такъв тип антидотна терапия. Интегрална част от проучването е създаването на методика, която да предсказва ефекта от липидната терапия при интоксикации с медикаменти, за които няма емпирични данни. Така съставът на липидната емулсия може да бъде оптимизиран за повишаване на ефикасността към лекарствени вещества, които са от интерес за клиничната токсикология.

За провеждане на експерименталната част от проучването беше подбран набор от лекарствени вещества (ЛВ), при които терапията се прилага успешно (положителни контроли) – Дифенхидрамин, Верапамил, Бупивакаин, Кветиапин, и такива, които са от интерес за клиничната практика, но при които не се наблюдава търсения ефект от терапията (отрицателни контроли) – Парацетамол и Бромазепам. И за двата типа контроли бяха определени константи на взаимодействие с водна и маслена фаза, както и взаимодействието им с албумин. Показано бе, че коефициентът на разпределение на ЛВ от групата на положителните контроли между маслената и водната фаза е много по-голям от коефициента на разпределение за ЛВ от групата на отрицателните контроли. Предложен е теоретичен модел за описание на равновесното разпределение на ЛВ между различните фази.

Изследването е финансирано от МОН по национална научна програма „ВИХРЕН“, проект ROTA-Active (КР-06-DV-4/16.12.2019).

СЕКЦИЯ ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ

Кристина Симеонова, ФХФ - СУ

Стоян Граматиков, ФХФ - СУ

Янислав Данчовски, ФХФ - СУ

Христо Рашеев, ФХФ - СУ

Любима Дашева, ФХФ - СУ

София Славова, ИОНХ - БАН

Йоанна Стойчева, ФХФ - СУ

Стоян Илиев, ФХФ - СУ

Симона Джумайска, ФХФ - СУ

Любен Бориславов, ФХФ - СУ

Гергана Костадинова, ФХФ - СУ

Васка Петакова, ФХФ - СУ

КВАНТОВОХИМИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА МЕХАНИЗМА НА ФОРМИРАНЕ НА 3,3'-ДИАЦЕТИЛ-[4,4'-БИХРОМАН]-2,2'-ДИОН

Кристина Симеонова¹, Християн Александров¹, Петко Петков¹

¹Факултет по химия и фармация, Катедра „Органична химия и фармакогнозия“, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, *ohks@chem.uni-sofia.bg*

Кумарините (2-оксо-2*H*-1-бензопираните) представят значим клас от природни хетероциклени съединения. Този клас съединения представлява особен интерес за съвременния органичен синтез и фармакология, поради широкото си разнообразие от биологична активност, която проявяват различните представители.

Дихидродимерите на кумарините, подобно на кумаринопроизводните, също притежават голямо разнообразие от биологично активни свойства. Част от тях намират широко приложение като лазерни багрила и биват използвани като флуоресцентни и калориметрични сензори.

Целта на настоящото изследване е, с помощта на квантовохимични изчисления, да се установят възможните реакционни пътища за получаване на хомодимер на 3-ацетилкумарини. За постигане на целта, бе оценена относителната стабилност на различни реакционни интермедиати и конформационни превръщания в 3-ацетилкумарин и негови производни.

За провеждане на квантовохимичните изчисления, бе използвана теория на функционала на плътността, с хибриден обменно-корелационен функционал B3LYP и базисен набор 6-31++G**. За отчитане ефекта на разтворителя е използван имплицитен модел (PCM) на THF.

Благодарности: Представеното изследване е финансирано от ФНИ по проект КП -06-Н39/15.

Цитати:

1. A. I. Koleva et. al, *Molecules*, 2019, vol. 24(11), 2030
2. Kise, *J. Org. Chem*, 2006, vol. 71, 9203-9207

КВАНТОВОХИМИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА ГЕРМАНИЕВИ ЦЕНРОВЕ В ГЕРМАНОСИЛИКАТНИ ЗЕОЛИТИ

Стоян Павлов Граматиков, Петко Петков, Георги Вайсилов

СУ „Св.Климент Охридски“, Факултет по Химия и Фармация, Катедра Органична химия и фармакогнозия, toper398@gmail.com

Два германосиликата SCM-14 и SCM-15 са синтезирани от Yi Luo и съавтори ^[1,2]. От експериментални данни е ясно, че германиевите хетероатоми заемат тетраедрични (T) позиции в малки структурни единици – двойни четиричленни пръстени (D4R). В процеса на синтез е използван протониран от флуороводородна киселина 4-пиридинопиридин, като структуро-насочващ агент. Стабилността на германосиликатите зависи както от разпределението на германиевите атоми в D4R единиците, така и от локализацията и ориентацията на флуоридния анион и органичната молекула в кухините на зеолитните клетки.

За да бъде определено разпределението на германиевите центрове в двете германосиликатни структури, са използвани квантовохимични и молекулно-динамични симулации. Моделирани са голям брой структури с различно начално разпределение на германиевите T-атоми, съответстващо на информацията от експерименталните данни. След оптимизация на зеолитните клетки, към моделите са добавени и различни комбинации от насоченост на 4-пиридинопиридина и позиция, заемана от флуоридния анион. На последния етап от симулациите системите от германосиликатни решетки, съдържащи темплейт са „нагreti“ до 300 K и са оставени да релаксират до достигане на равновесие. Сравнена е стабилността и геометрията на структурите, оптимизирани преди и след добавянето на органичния темплейт в тях.

Въз основа на относителните енергии, получени от теоретичното изследване, са направени изводи за влиянието на – i) локализацията на флуоридния анион, ii) ориентацията на структуро-насочващия агент и iii) разпределението на германиевите центрове в двойните четиричленни пръстени върху крайната структура и стабилност на германосиликатните зеолити.

Цитати:

1. Y. Luo, S. Smeets, F. Peng, A. S. Etman, Z. Wang, J. Sun, and W. Yang (2017). Synthesis and Structure Determination of Large-Pore Zeolite SCM-14. *Chem. Eur. J.* , 23, 16829 – 16834.
2. Y. Luo, S. Smeets, Z. Wang, J. Sun, and W. Yang (2019). Synthesis and Structure Determination of SCM-15: A 3D Large Pore Zeolite with Interconnected Straight 12V12V10-Ring Channels. *Chem. Eur. J.* , 25, 2184-2188.

МОЛЕКУЛНО МОДЕЛИРАНЕ НА МЕТАЛНИ КОМПЛЕКСИ С ЛИГАНДИ ХИНОЛОВИ ПРОИЗВОДНИ ЗА СЪХРАНЕНИЕ НА Li-ЙОНИ

Янислав Данчовски^{1,2}, Христо Рашеев^{1,2}, Радостина Стоянова², Аля Таджер^{1,2}

¹Факултет по химия и фармация, Софийски университет, София 1164, България

²Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките,

София 1113, България

email: ydanchovski@chem.uni-sofia.bg

Традиционно електродите на предлаганите на пазара Li-йонни батерии (ЛЙБ) са от неорганичен произход и съдържат предимно оксиди на преходни метали. Приложението на органични материали като електроди за ЛЙБ обаче напоследък е обект на интензивно изследване предвид редица преимущества на тези материали и разнообразието от възможности за повишаване на производителността. Сред предимствата им са: сравнително лесен синтез, възможност за промени в структурата, водещи до промени в окислително-редукционните свойства, ниско тегло, лесни за моделиране и интерпретация на резултатите и т.н. Комбинацията от преходен метал и органични компоненти би могла да доведе до удвояване на специфичния им капацитет, тъй като и двата компонента ще служат едновременно като редокс-центрове за Li-интеркалация.

Настоящото изследване е съсредоточено върху определяне на електрохимичния потенциал при редукцията с Li на комплекси на никел и ванадий с лиганди производни на бензохинона. Конструирани са модели на комплекси на металните йони в различни окислителни състояния: Ni(II) и Ni(IV), както и V(III), V(V) и VO²⁺, с два органични лиганда. Оценените с DFT потенциали на реакциите на поетапна редукция с Li са пресметнати чрез изменението на свободната енергия след структурна релаксация на участниците в процеса. Всяка стъпка на редукция е цялостно изучена по отношение на електронна и геометрична структура. Резултатите показват, че както никеловите, така и ванадиевите комплекси имат капацитет за значима Li интеркалация, като при това се запазва стабилността на структурата. Стойностите на електродния потенциал на различните етапи на редукция говорят за възможни приложения на тези комплекси като иновативни електродни материали. Подобна стратегия за комбиниране на два типа редокс-активни компоненти би могла да доведе до дизайн на обещаващи нови материали за съхранение на енергия.

Благодарности:  КП-06-ДВ-6/2019

МОДЕЛИРАНЕ НА АДСОРБЦИЯ И ДЕСОЛВАТАЦИЯ НА МОНО- И ДИЯДРЕНИ СОЛВАТАЦИОННИ КОМПЛЕКСИ ВЪРХУ ЕЛЕКТРОДНА ПОВЪРХНОСТ

Христо Рашеев^{1,2}, Радостина Стоянова², Аля Таджер^{1,2}

¹*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“ №1, София 1164, fhhr@chem.uni-sofia.bg*

²*Институт по обща и неорганична химия към БАН, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 11, София 1113*

Функционирането на съвременния свят е немислимо без презаредимите литиево-йонни батерии (ЛЙБ) поради повсеместната им употреба в преносими електронни устройства и транспортни средства, чийто брой нараства с всяка изминала година. Въпреки превъзходните си експлоатационни качества, недостатъците на ЛЙБ като ограничени количества от съставните елементи литий и кобалт, както и свързаната с това цена и отрицателно влияние върху околната среда, обуславят активното търсене на алтернативи. Едно от направленията в развитието на нови презаредими батерии е комбинирането на два различни йона (например Li^+ и Mg^{2+}) като токоносители. Специален интерес представляват процесите, които се извършват на границата електрод-електролит, а именно десолватацията на йоните и адсорбцията им върху електродната повърхност.

Нашето изследване е съсредоточено върху моделиране на едно- и двуядрени комплекси на Li^+ , Na^+ и Mg^{2+} с етилен карбонат върху (111) повърхност от обещаващия електроден материал литиев титанат – $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$. Проведени са квантово-химични изчисления в периодични условия в рамките на Теорията на функционала на плътността (DFT) с базис от плоски вълни по метода PAW, като е използвано приближението PBE за пресмятане на обменната и на корелационната енергия. На база енергия на взаимодействие са определени предпочетените места за адсорбция върху моделната повърхност. Оценена е енергията на десолватация на моделираните единични и двойни комплекси и е сравнена с резултати, получени за свободни кълстери в газова фаза и в имплицитен разтворител, като по този начин е направена количествена оценка на ролята на повърхността.

ТЕОРЕТИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА КОМПЛЕКСИ НА ВКЛЮЧВАНЕ НА БИОЛОГИЧНО ЗНАЧИМИ МАКРОЕЛЕМЕНТИ В КУКУРБИТУРИЛИ

Любима Дашева¹, доц. д-р В. Николова², доц. д-р С. Ангелова³

¹Софийски университет „Св. Климент Охридски“, *lyubima_d_dasheva@abv.bg*

²Софийски университет „Св. Климент Охридски“, *ohtvd@chem.uni-sofia.bg*

³Институт по оптически материали и технологии към БАН “Акад. Йордан Малиновски”, *sea@iomt.bas.bg*

Надмолекулните или супрамолекулни комплекси, базирани на класически синтетични макроциклични молекули гостоприемници като циклодекстрините и каликсарените са обект на голямо внимание през последните десетилетия поради широкото им приложение като биологични и химически сензори, агенти за биоизображение, носители за доставка на лекарства, флуоресцентни материали и др. Кукурбит[n]урилите са друга група кавитанди, известни със своя висок афинитет към различни гост молекули. Въпреки че са признати като потенциални биомиметични скелета, те все още не са тествани като металоензимни модели и не се знае много за техните свойства да свързват метали. Освен това няма систематично проучване на ключовите фактори, контролиращи процесите на метална координация към тези системи. В нашето изчислителното проучване се използва молекулно моделиране на основата на Теорията на функционала на плътността, за да бъдат изследвани взаимодействията на биологично значими (моно- и двувалентни) метални катиони в кукурби[n]урили и да бъдат оценени основните детерминанти, обуславящи процеса. Оценени са термодинамичните дескриптори (енергии на Гибс в газовата фаза и във водна среда) на съответните реакции на комплексообразуване. Оценено е и влиянието на различни фактори върху термодинамиката на домакин-гост взаимодействията, като например размера на кухината на гостоприемника, природата на метала (заряд на катиона, размер и присъщи химични свойства), неговото местоположение в комплекса, предпочетен брой йонни връзки, както и наличието или отсъствието на метална хидратна обвивка. Получените резултати хвърлят светлина върху механизма на домакин-гост разпознаването и разкриват факторите, които оказват специално влияние върху процеса на свързване на кукурбитурили с метали.

Цитати:

1. N. Kircheva, S. Dobrev, L. Dasheva, I. Koleva, V. Nikolova, S. Angelova, T. Dudev, *Royal Society of Chemistry Adv.*, 2020, vol. 10, 28139-28147

ХИМИЧНА ЕВОЛЮЦИЯ – ОБРАЗУВАНЕ НА ПТЕРИНИ И ГУАНИН ОТ ФОРМАМИД

София Славова, Венелин Енчев

*Българска академия на науките, Институт по обща и неорганична химия,
ул. "Акад. Георги Бончев" бл.11, 1113 София, БЪЛГАРИЯ
sslavova@svr.igic.bas.bg venelin@svr.igic.bas.bg*

Произходът на живота е един от фундаменталните въпроси за науката. Днес циановодородът и формамидът се считат за ключови молекули в пребиотична химия. Пребиотичните синтези на градивните елементи на РНК и ДНК (пурини, пиримидини и въглехидрати) и протеини (α -аминокиселини) от прости молекули са добре изследвани. Обаче пребиотичното образуване на коензими рядко се обсъжда в съвременната наука, тъй като експерименталните данни за пребиотичната химия на коензимите са оскъдни.

Наскоро, едновременно с нуклеинови бази и аминокиселини, за първи път от нас беше получен и кофактор птерин, само при загряване на формамид. Кофакторите са органични молекули, които са от съществено значение за ензимно катализирани реакции и следователно за живота. Това изцяло променя виждането за образуването му в процеса на химичната еволюция.

Целта на тази работа е обяснение на механизма на реакциите, по които се получава птерин и негови производни от чист формамид.

Всички реакционни пътища бяха изследвани чрез квантово-химични изчисления на теоретични нива MP2 и SCS-MP2 с cc-pVDZ базисен набор и с отчитане на влиянието на разтворителя. Изчисленията са направени с квантово-химичния пакет GAMESS.

Ние предлагаме единен реакционен път за образуване на птерини и гуанин от чист формамид без наличие на минерален катализатор. Всички необходими реагенти се получават при частично разлагане на формамид, а реакциите се катализират само от формамид или формимидинова киселина, която се образува в първия етап на реакционния път. Показано е, че пребиотичното образуване на нуклеобазии и птерини са тясно свързани процеси и протичат заедно.

Благодарности: Тази работа е подкрепена от МОН чрез Национална Програма „Млади учени и постдокторанти“, одобрена от ДСМ #577/17.08.2018. Квантово-химичните изчисления са извършени на изчислителен комплекс АВИТОХОЛ, Център за иновативни пресмятания и обработка на данни – БАН.

КУМУЛЕНИ – КЛЮЧ КЪМ МИСТЕРИЯТА НА СТРУКТУРАТА НА КАРБИНА

Йоанна Стойчева, Аля Таджер, Юлия Романова

*Факултет по химия и фармация, СУ “Св. Климент Охридски”,
бул. “Джеймс Баучер” 1, София 1164, stoycheva.joanna@gmail.com*

Човечеството от векове познава тримерните форми на въглерода – диамант и графит, но превръщането между тях изисква екстремни условия. В последните десетилетия вниманието на учените завладя двумерният въглерод – графенът, чиито потенциални и реални приложения ежедневно се множат. Ред е да се изучи едномерният въглерод – карбинът – най-загадъчната алотропна форма на въглерода, чиято структура поражда редица въпроси, но и множество надежди за възможни бъдещи приложения.

За образуването на едномерна верижка от въглеродни атоми са възможни два начина на свързване:

- редуване на проста и тройна връзка – образува се полиин.
- поредица от двойни връзки – образува се кумулен.

Двете геометрични конфигурации водят до различни електронни структури и следователно до различни свойства. Съществуват доказателства за това, че кумуленната форма притежава дирадикалов характер (отворен характер на електронната обвивка), което би довело до възстановяване на алтернацията в дължините на връзките и полииноподобна структура. Актуален подход към разбиране структурата на кумулените, а съответно и на карбина, представлява оценката на ротационните бариери. Ротационните бариери при кумулени са пряко свързани със силата на спрежението им и показват доколко връзката е проста или двойна.

Целта на проучването е установяване на ефекта на дължината и енергетичната бариера на преминаване между двете форми на карбина – полиинна и кумуленна – върху структурните и електронните характеристики на четни едномерни въглеродни верижки. Използван е набор от квантовохимични подходи – основани на теорията на функционала на плътността (DFT), както и методи, базирани на вълновата функция, отчитащи статичната електронна корелация (CASSCF/CASPT2).

МОДЕЛИРАНЕ НА КРИСТАЛИЗАЦИЯ НА ХЕКСАДЕКАН В ОБЕМ И НА ФАЗОВА ГРАНИЦА С МОЛЕКУЛНА ДИНАМИКА

С. Илиев, С. Цибранска, А. Иванова, С. Чолакова, Н. Денков

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
бул. Дж. Баучер № 1, 1164 София, България; e-mail: fhsi@chem.uni-sofia.bg*

При преминаване между течно и твърдо агрегатно състояние дълговерижни алкани и такива със средна дължина на веригата образуват преходна фаза между изотропна течност и кристал, наречена ротаторна. В това състояние системите се характеризират с далечен порядък и в трите направления на пространството, но молекулите имат известна свобода на въртене около дългата си ос. Ротаторните фази притежават особени вископластични свойства, които намират приложение в химическата индустрия и фармацията. При емулсии от алкан-съдържащи капки в ротаторна фаза се наблюдава спонтанна промяна на геометричната форма на тези капки.¹ Това свойство може да бъде използвано при изграждането на сложни йерархични надмолекулни конструкции.² До момента структурните характеристики на ротаторните фази, както и влиянието на средата върху тях, не са известни в детайли на молекулно ниво.

В настоящото изследване са изградени модели на хексадекан в обем и на повърхност хексадекан/вода. Проведени са атомистични молекулно-динамични симулации със силови полета CHARMM36/TIP4P за проследяване на процеса на замръзване в моделните системи. При обемен хексадекан е наблюдаван преходът от течно към твърдо състояние при различни температури и е проследен ефектът на скоростта на охлаждане върху този процес. От резултатите е направено заключението, че симулациите успяват да опишат основните характеристики на процеса на замръзване, а различната скорост на охлаждане не влияе качествено на механизма на кристализация. При системите на фазова граница е изследван ефектът на кривината върху механизма на преминаване между различните фази. За оценка на междумолекулното подреждане и на фазовото състояние на системите са анализирани няколко структурни и термодинамични параметъра.

Проучването е финансирано от Министерство на образованието и науката по национална научна програма „ВИХРЕН“, проект ROTA-Active (KP-06-DV-4/16.12.2019).

Цитати:

¹ D. Cholakova, N. Denkov, *Adv. Colloid interface Sci.*, 2019, 269, 7-42.

² N. Denkov, S. Tcholakova, I. Lesov, D. Cholakova, S.K. Smoukov, *Nature*. 2015, 528, 392-5.

МОДЕЛИРАНЕ НА МОЛЕКУЛНИ СТРУКТУРИ ЗА ЕМИТЕРИ НА СИНЯ СВЕТЛИНА

Симона Джумайска¹, Георгия Иванова¹, Неда Тодорова¹, Юлиан Загранярски²,
Анела Иванова¹

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
¹ Катедра Физикохимия/² Катедра Органична химия и фармакогнозия
бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164 София, s.djumayska@abv.bg*

През последните няколко десетилетия технологичният напредък ни тласка към търсенето на нови и по-ефективни източници на светлина. Едни от тях са органичните светодиоди (OLED), които през последните 30 години се развиват с бърз темп [1]. Едни от съвременните OLED са базирани на флуоресциращи или фосфоресциращи емитери. Днес голям интерес е насочен към устройствата, които работят на принципа на термично активирана забавена флуоресценция (TADF) [2]. При тях се осъществява преход от триплетно към синглетно възбудено състояние, което повишава ефективността на светене на диода. Едно от най-сериозните предизвикателства пред индустрията се явява разработването на такива емитери на синя светлина [3]. То може да бъде подпомогнато от молекулно моделиране.

В настоящата работа са представени резултати от квантовохимични изчисления на потенциални съединения, които са подходящи за емитери на синя светлина. Разгледани са молекули съдържащи в структурата си дибензофуранов π -спрегнат мостов фрагмент, към който са свързани различни електрон-донори и електрон-акцептори. Молекулните структури са оптимизирани с DFT метод и са получени абсорбционни и емисионни преходи с TDDFT метод. Използвани са функционал B3LYP и базис 6-31G*. Въз основа на получените резултати е оценена възможността за TADF в различните молекули и капацитета им да излъчват синя светлина. Най-перспективните кандидати са предложени за синтез и експериментално характеризирани.

Работата е финансирана от Фонд „Научни изследвания“, договор № КП-06-Н49/3 от 26.11.2020 г.

Цитати:

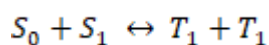
- [1] D. Volz, J. Photon. Ener., **2016**, 6, 020901
- [2] Q. Wei, Z. Ge, Macromol. Rapid Commun. **2019**, 40, 1800570
- [3] C.Y. Tu, W.Z. Liang, Org. Electron. **2018**, 57, 74

ТЪРСЕНЕ НА ХРОМОФОРИ ЗА СИНГЛЕТНО РАЗЦЕПВАНЕ ЧРЕЗ МАШИННО ОБУЧЕНИЕ

Любен Бориславов, Мирослава Недялкова, Аля Таджер, Юлия Романова

*СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“
1, 1164 София, България, e-mail: jromanova@chem.uni-sofia.bg*

Синглетното разцепване (SF) е процес при който дадена молекула, възбудена до първото си синглетно състояние може да взаимодейства със съседна молекула, в основно състояние, в резултат на което се получават два триплетни екситона:



Хромофорите, които могат да участват в процес на синглетно разцепване, намират приложение като материали за органични фотоволтаични клетки, тъй като при облъчване със слънчева светлина тези хромофори са в състояние да произведат четири частици-носители на заряд, вместо само две, което от своя страна позволява надхвърляне на границата на Shockley–Queisser за максимална ефективност на фотоволтаична клетка. За да може дадена молекула да претърпява синглетно разцепване трябва да бъдат изпълнени следните условия за енергиите на възбуждане:

$$\begin{aligned} 2E(T_1) - E(S_1) &\leq 0 \\ 2E(T_1) - E(T_2) &\leq 0 \end{aligned}$$

Дирадикаловият характер (DRC) се дефинирана като удвоеното тегло на двойно-възбудената конфигурация във вълновата функция на основното състояние в рамките на CASSCF-метода. Макар и да не може да бъде измерен експериментално, DRC е пряко свързан с различни химични, физични и спектрални свойства на дирадикалоидите. Известно е, че хромофорите с дирадикалов характер между 0.05 и 0.50 са склонни да участват в синглетно разцепване.

В рамките на настоящото изследване беше създадена база от данни, съдържаща квантово-химични и хеометрични дескриптори на голям брой органични съединения. Беше разработена ефективна, базирана на машинно обучение, прескриптивна процедура за намиране на потенциални SF-хромофори в базата от данни. Беше изведен регресионен модел, позволяващ бързо определяне на приблизителната стойност на DRC на намерените потенциални SF-хромофори.

N-ХЕТЕРОЦИКЛЕНИ КАРБЕНОВИ ДИМЕРИ: НОВ КЛАС ХРОМОФОРИ ЗА СИНГЛЕТНО РАЗЦЕПВАНЕ

Гергана Костадинова¹, Румен Ляпчев¹, Аля Таджер¹, Marc de Wergifosse²,

Юлия Романова¹

¹СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, София 1164, България

²Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Bonn, Germany

Успешна стратегия за преодоляване на максималната теоретичната ефективност на соларните клетки (граница на Shockley-Queisser) е използването на фотоактивни материали, способни на синглетно разцепване. Първият документиран материал за синглетно разцепване – антрацен, е установен през 1963 година, но се оказва относително неефективен поради малкото си π -спрежение. Близо половин век по-късно е показано, че ефективни хромофори за синглетно разцепване са по-големите представители на ацените – тетрацен и пентацен. Напоследък молекулният дизайн в областта се простира отвъд ацените и за синглетно разцепване са предложени нови хромофори на база спрегнати полимери/олигомери, полиени, картеноиди и карбени. Въпреки това, наборът от молекули, способни на синглетно разцепване, е скромнен и взаимовръзката между структура и свойства при такива материали е слабо изучена.

Настоящото теоретично изследване е посветено на N-съдържащи хетероциклени карбенови димери като потенциални материали за синглетно разцепване. За целта сме използвали новосъздадената *spin-flip* опростена формулировка на времевата теория на функционала на плътността. Всички съединения са предложени за първи път в нашата лаборатория, могат да бъдат синтетично получени и са с потенциално приложение в соларни клетки. Избраният молекулен набор позволява да бъде изследван в детайли ефектът на фактори като топология, конформация, размер на спрежението и позиция на заместителя върху способността за синглетно разцепване.

С ДИРАДИКАЛОВ ХАРАКТЕР ИЛИ БЕЗ – ТОВА Е ВЪПРОСЪТ

Васка Петакова, Мирослава Недялкова, Йоанна Стойчева, Аля Таджер, Юлия Романова

*СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, София 1164, България,
email: jromanova@chem.uni-sofia.bg*

Броят на научните сведения за уникалните характеристики и високия приложен потенциал на съединения с дирадикалов характер непрекъснато расте. В последното десетилетие са направени няколко научни пробива в това направление. Показано е, че молекулите с нисък до среден дирадикалов характер са из малкото добри кандидати за синглетно разцепване и следователно са обещаващи високоефективни фотоволтаици. Както и, че съединения със среден дирадикалов характер се характеризират със завидно големи стойности на втората хиперполяризуемост и са атрактивни материали за органичната фотоника.

Всичко това показва, че наличието на дирадикалов характер подсилва и дори поражда желани оптични свойства и е модерна стратегия за молекулен дизайн. На каква цена обаче съединенията с отворена електронна обвивка предоставят уникалните си свойства? Наред с всички позитиви, дирадикаловият характер е често свързан с ниска стабилност и висока реактивоспособност - нежелани молекулни характеристики за практическото приложение на тези материали. Ето защо, от фундаментална и приложна гледна точка е важно да бъде изследвана в детайли взаимовръзката между дирадикалов характер и стабилност. В същото време в литературата няма достатъчно научни сведения по проблема. За целта ние извършихме квантово-механични изчисления върху поредица от *o*- и *p*-хинонметиди, като пресметнахме както дирадикаловия характер, така и индексите на реактивоспособност. Избраните съединения са докладвани в литературата и са налични данни за тяхната стабилност и реактивност в лабораторни условия. Резултатите от изследването позволяват да отговорим на въпроса дали съществува компромис между наличие на дирадикалов характер и стабилност.

СЕКЦИЯ ФИЗИКОХИМИЯ

Мария Пимпилова, ХФ - ПУ

Невелин Борисов, ИЕЕС - БАН

Трифон Шопов, ИЕЕС - БАН

Йоана Станимирова, ХТМУ

РАЗРАБОТВАНЕ НА НОВ $\text{Co}_3\text{O}_4\text{-g-C}_3\text{N}_4$ - NAFION™ КОМПОЗИТЕН КАТАЛИЗАТОР ЗА ЕЛЕКТРОХИМИЧНА РЕДУКЦИЯ НА ПЕРОКСИДНИ СЪЕДИНЕНИЯ ВЪВ ВОДНА СРЕДА

Мария Пимпилова, Ванина Иванова – Колчева, Мария Стоянова, Нина Димчева

*Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“,
Химически факултет, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000,
e-mail: pimpilova@uni-plovdiv.bg*

През последните няколко години се наблюдава все по-засилен научно-изследователски интерес към пероксидните съединения поради широкото им разпространение като (i) нежелани продукти, получени в резултат на пероксидация на растителни масла, органични разтворители и др., (ii) изобелващи вещества в хартиената и текстилната индустрии; (ii) съставки във фармацевтични продукти. В настоящото изследване е разработен и охарактеризиран високочувствителен химически-модифициран стъкловъглероден електрод (GCE) за детекция на пероксиди във водна среда при $\text{pH}=7$. Модифициращата фаза, състояща се от Co_3O_4 (5wt.%Co) интегриран в слоестата 2d-структура на графитен въглероден нитрид ($\text{g-C}_3\text{N}_4$) е диспергирана в алкохолен разтвор на полимера Nafion™ и последващо отложена на повърхността на GCE под формата на полимерна суспензия в Nafion™. Електрокаталитичната активност на $\text{Co}_3\text{O}_4\text{-g-C}_3\text{N}_4\text{-Nafion}^{\text{TM}}$ - модифицирания стъкловъглероден електрод във водна среда беше изследвана по отношение на моделните водоразтворими хидропероксиди - водороден пероксид H_2O_2 и третичен бутил хидропероксид (ТВНР). Резултатите от електрохимичните изследвания, проведени във фосфатен буфер ($\text{pH}=7$), показаха че електрохимичната редукция на водоразтворимите хидропероксиди върху Nafion™ - модифицирания стъкловъглероден електрод започва при $-0,3\text{V}$ (vs. Ag/AgCl, sat. KCl). Включването на малки количества от дотирания с Co $\text{g-C}_3\text{N}_4$ в слоя на модификатора от Nafion™ води до отместване на редукционния потенциал на хидропероксидите с повече от $0,1\text{ V}$ в положителната посока и до приблизително 10 пъти по-висока чувствителност на аналитичния сигнал. Резултатите ясно показват наличието на синергичен ефект между двата компонента в композитния катализатор. Оптимизиран е методът на отлагане на модифициращата фаза върху повърхността на стъкловъглеродния електрод, както и продължителността и температурата на процеса на сушене на $\text{Co}_3\text{O}_4\text{-g-C}_3\text{N}_4\text{-Nafion}^{\text{TM}}$ -модифицирания електрод.

Благодарности: Изследването е финансирано от проект към МОН КП – 06- Н39/8 „Хемо – ензимен катализ в неводна среда“ (2019/2022)

МУЛТИСЛОЙНИ НИКЕЛ-БАЗИРАНИ ЕЛЕКТРОДИ ЗА ВОДНИ ЕЛЕКТРОЛИЗЬОРИ СЪС „ZERO-GAP“ КОНФИГУРАЦИЯ

Невелин Борисов, Галин Борисов, Евелина Славчева

Институт по електрохимия и енергийни системи „акад. Евгени Будевски“, 1113, София, България, e-mail: n.borisov@iees.bas.bg

Алкалните „zero-gap“ водни електролизьори са сравнително нова атрактивна технология за получаване на водород с висока чистота (>99.9999%). Този тип устройства имат компактни размери, високи плътности на тока, възможност за работа в широк температурен диапазон (20С-95С) и енергийна ефективност повече от 75%. В настоящия доклад е представено електрохимичното поведение на пилотен алкален воден електролизьор DUAL Cell, работещ с керамична диафрагма (Zifron Perl 500) и мултислойни електроди. Механичният скелет на анода и катода е изграден изцяло от никлова пяна (Nickel-foam), върху която е нанесен микропоресет активен слой с високо развита повърхност, състоящ се от никел на прах и свързващо вещество тефлон (PTFE). Активността на електродите, както и тяхната корозионна устойчивост са детайлно изследвани в стандартна триелектродна електрохимична клетка посредством циклична и линейна волтаперометрия. Експериментите са проведени в разтвор на 25%КОН при стайна температура. Установено е, че при потенциал от 2V се достига плътност на тока 200 mA.cm⁻², като на се регистрират признаци на деградация. След първоначалното електрохимично охарактеризиране работните електроди са вградени в лабораторен прототип на воден електролизьор DUAL CELL [полезен модел №5061], чийто дизайн съчетава елементи от класическите алкални водни електролизьори и съвременните конструкции на електролизьори с полимерна електролитна мембрана. Дотирането на диафрагмата се извършва директно в клетката чрез циркулация на 25% КОН за 24 часа при стайна температура. Снети са волтаперни характеристики при условия близки до реалните за работа на такъв тип електролизьори. Показано е, че при напрежение на клетката от 2V и температура 80 °С, плътността на тока достига 800 mA.cm⁻². Получените резултати показват стабилно електрохимично поведение и еднакви показатели на двете единични клетки по време на дългосрочни ускорени тестове при стайна температура.

Благодарности: Изследването е подкрепено от Министерство на образованието и Науката чрез Национална научна програма ЕПЛЮС „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита“, D01-214 / 2018. За експериментите е използвана апаратура от НИ СЕВЕ, ДО1-160/28.08.2018

СИНТЕЗИРАНЕ НА ВЪГЛЕРОДНИ КСЕРОГЕЛОВЕ И ТЯХНОТО ПРИЛОЖЕНИЕ В СИСТЕМИ ЗА СЪХРАНЕНИЕ НА ЕНЕРГИЯ

Трифон Шопов¹, Албена Александрова², Мария Матракова², Борислава Младенова²,
Антония Стоянова²

¹ ХТМУ, Неорганични и електрохимични технологии и защита от корозия,
Бул. Климент Охридски №8 София, 1756, tr.shopov@gmail.com

² ИЕЕС, Електрохимични източници на ток, София, ул. Акад.Г.Бончев, бл. 10,1113,
albena.aleksandrova@iees.bas.bg

В настоящата работа е изследвано влиянието на въглероден ксерогел (CXG), като добавка в отрицателната активна маса (NAM) на оловния акумулатор, върху електричните характеристики и продължителността на живот при режим на циклиране с висока скорост и частична степен на зареденост (HRPSoC).

Въглеродният ксерогел (CXG) е синтезиран чрез поликондензация на ресорцинол $C_6H_6O_2$ и формалин 37% р-р. С помощта на NaOH е контролирана рН стойността на разтвора до 6.5. Желирането, втвърдяването и изсушаването на гела е извършено чрез микровълнова обработка. Полученият ксерогел е подложен на допълнителна високо-температурна обработка [1]. Материалът е охарактеризиран структурно и морфологично с помощта на трансмисионен електронен микроскоп (ТЕМ), рентгенова дифракция (XRD) и определяне на специфичната повърхност (ВЕТ).

Влиянието на избраната добавка CXG върху електрохимичното поведение на отрицателният електрод е изследвано в лабораторни оловни клетки с една отрицателна и две положителни плочи с номинален капацитет 115 mAh. За сравнение е тествана контролна клетка без въглероден продукт в NAM. Концентрацията на изследваната въглеродна добавка е 0.25% CXG, спрямо количеството оловен оксид. Въздействието на добавката върху разрядния капацитет на отрицателните плочи се оценява при скорост на разрядния ток $C/20$. Ефектът от добавянето на CXG в отрицателния електрод върху продължителността на живота на батерията е изследван при режим на циклиране с висока скорост и частична степен на зареденост, характерен за работата на батериите в хибридни автомобили. Контролната клетка, осигурява живот само 600 микро-цикъла. За разлика от това лабораторната клетка с 0.25% CXG в NAM има продължителност на живот 970 микро-цикъла.

Благодарности: Авторите благодарят за финансовата подкрепа на Министерството на образованието и науката на Република България в рамките на Национална програма „Европейски научни мрежи“, споразумение Д01-286/07.10.2020 г.

Цитати:

I. E. G. Calvo, C. O. Ania, L. Zubizarreta, J. A. Menéndez, A. Arenillas, Energy Fuels 2010, vol. 24 3334–3339/

**САМООРГАНИЗИРАНИ ПОЛИПИРОЛ НАНОПОРИ,
ОБРАЗУВАНИ ЧРЕЗ КОНТРОЛИРАНА
ЕЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ВЪРХУ
ПОДЛОЖКА ОТ Ti**

Й. Станимирова¹, В. Карастоянов²

¹*Химикотехнологичен и Металургичен Университет, 1756 София,
e-mail: yoana.h.stanimirova@gmail.com*

²*Химикотехнологичен и Металургичен Университет, 1756 София,
e-mail: vasko_kar@uctm.edu*

Целта на проучването е да се използва концепцията на електрополимеризация за покриване на метални повърхности за медицински изделия с полимерен слой, който подобрява тяхната повърхностна биосъвместимост и позволява контролирано освобождаване на биоактивни агенти от тези повърхности. Настоящата работа е за изследване на електрополимеризацията на пирол върху подложка от титан (99,9% Гуудфелю).

За синтезирането на PPy (полипирол) върху Ti се използва електрохимичен метод на циклична волтаметрия в триелектродна система, като се използва Ti като работен електрод, Pt като противоелектрод и Ag / AgCl / 3M KCl като сравнителен електрод във воден разтвор, съдържащ 0,1 M пиролов мономер и 0,1 M сярна киселина (H₂SO₄). Потенциалът нараства от 0 до 1,3 V. За характеризиране са използвани електрохимични методи EIS (електрохимична импедансна спектроскопия) и Mott - Schottky.

Ключови думи: титан, циклична волтаметри, пиролов мономер, EIS, Mott - Schottky
Анодно окисление, полипирол.

Автор за кореспонденция: гл.ас.д-р Васил Карастоянов, e-mail: vasko_kar@uctm.edu

СЕКЦИЯ АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ

Мария Петрова, МУ - Варна

Лидия Кайнарова, ХФ - ПУ

Ива Беловеждова, ФХФ - СУ

ОПТИМИЗИРАНЕ И ВАЛИДИРАНЕ НА ВЕТХ МЕТОДИКА ЗА ОПРЕДЕЛЯНЕ НА АКТИВНИТЕ СУБСТАНЦИИ В СУХ ЕКСТРАКТ ОТ БЯЛ ТРЪН

Мария Петрова¹, Алекс Русев², д-р Стефан Аврамов³

¹ МУ „проф. д-р П. Стоянов“ - Варна, Факултет по Фармация, гр. Варна, п.к. 9000
ул. "Цар Освободител" 84, maria_todorowa@abv.bg

² СУ „св. Климент Охридски“, Факултет по Химия и Фармация, гр. София, п.к. 1164,
бул. Джеймс Баучър 1, aleks.rusev94@gmail.com

³ Хромасист ООД, R&D лаборатория, гр. София, п.к. 1113, “ул. акад. Г. Бончев”, блок
104, вх. Б, ет. 2, stefavramov@chromassist.com

Фармацевтичният продукт Силимарин е стандартизиран екстракт от семена на растението бял трън, съдържащ смес от флавоноиди (силибинин, изосилибинин, силикринин, силидианин и други). Използва се като хранителна добавка, която предпазва черния дроб от вредните ефекти на алкохола, околната и работната среда, и т.н. В Европа екстрактът от бял трън се предписва като лекарство при лечение на алкохолна цироза, хронично чернодробно възпаление, увреждания на черния дроб и остър вирусен хепатит в следствие употребата на алкохол и лекарства.

Тъй като силимарин съдържа набор от силибинини с еднаква химична структура е важно да бъде използван високоефективен течнохроматографски (ВЕТХ) метод за количествено и качествено определяне на компонентите. Това повишава изискванията към използваните течнохроматографски (ТХ) методи, които трябва да имат висока резолюция между всички аналити и висока възпроизводимост на резултатите. От друга страна, в индустрията, времето за анализ трябва да бъде възможно най-кратко, като по този начин се повишава ефективността и се намаляват разходите. Ето защо стандартните ТХ методики трябва да бъдат променени чрез използването на нови ТХ технологии, които намаляват на времето за протичане на анализа и в същото време да се запазва хроматографското представяне.

Чрез използването на ТХ колони с по-малки размери и частици с твърдо ядро, оригиналният метод за определяне на активни субстанции беше оптимизиран, което доведе до намаляване на времето за анализ с 4 пъти. Добрите резултати бяха постигнати и от гледна точка на чувствителността и репродуктивността на метода. Течнохроматографските колони с частици с твърдо ядро могат да бъдат използвани при ТХ оборудване с максимално налягане от 600 бара и нагоре. Оптимизираният метод беше валидиран според Международния съвет за хармонизация на техническите изисквания към фармацевтичните продукти за хуманна употреба (ICH) и може да бъде използван в лаборатории за контрол на качеството.

ИЗСЛЕДВАНЕ ПРИНОСА НА ШУМА НА СИГНАЛА КЪМ НЕОПРЕДЕЛЕНОСТТА НА РАЗМЕРИТЕ НА ЕДИНИЧНИ НАНОЧАСТИЦИ, ИЗМЕРВАНИ ЧРЕЗ spICP-MS

Л. Кайнарова, Д. Георгиева, В. Стефанова

ПУ „Паисий Хилендарски“, Катедра Аналитична химия и Компютърна химия, гр. Пловдив, бул. Цар Асен III №24, П.К. 4000 e-mail: lykainarova@uni-plovdiv.net

Изследван е подход за оценяване неопределеността по отношение размерите на единични AgНЧ при spICP-MS. За целта са измервани сигналите на хомогенни йонни стандарти, доставящи за дадено време на интегриране (t_d 3-10 ms), идентична маса на сребро до детектора, която съответства на сферични AgНЧ с диаметри от 20 nm до 100 nm. Въвеждането на желаната маса на Ag (fg) е осигурено посредством вариране на концентрациите на стандартите, изчислени чрез създаден от нас модел, включващ физическите характеристики на НЧ и инструменталните параметри на измерването. Концентрациите на калибрантите са разпределени еквиливантно в целия диапазон (през ~10nm), което гарантира добро описание на зависимостта сигнал/диаметър на НЧ.

Доказано е сходството в ефективността на генериране на Ag⁺ при калибрация по йонни стандарти и референтни материали на НЧ. Изследвана е връзката между шума на сигналите и времето за интегриране. Статистически е доказано, че при въвеждане на еднаква маса на Ag, посредством хомогенни йонни разтвори, шумът на регистрираните сигнали силно зависи от масата, но не и от избраното t_d . Това ни дава основание да използваме стандартното отклонение на сигналите като оценка за присъщите за ICP-MS флукуации в процесите на йонизация и транспорт на йонния поток, следователно и за изчисляване неопределеността на диаметъра за всяка наночастица.

При прилагане на 1σ критерий неопределеността по отношение на диаметри на изследваните наночастици варира в интервала от 3 до 5nm.

Неопределеността на диаметъра на единична НЧ обуславя разделителната способност на spICP-MS метода при наноматериали с различен състав и размери, която е пряко свързана както с аналитичните характеристики, така и с коректното кълъстиране при разпределението по размери.

Авторите изказват благодарности към проект INISA DN19/9 (2017-2020) и програма „Млади учени и постдокторанти“ 2020

ИЗСЛЕДВАНЕ ВЪЗМОЖНОСТИТЕ НА ПОЛУКОЛИЧЕСТВЕН ICP-MS МЕТОД ЗА ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА ТЕЧНИ И ТВЪРДИ ОТПАДЪЦИ

Ива Беловеждова¹, Валентина Любомирова¹

¹ - Учебно-научна лаборатория по Следови анализ: ИСП техники и радиоаналитични методи, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, гр. София 1164, бул. Джеймс Баучър 1, ahib@chem.uni-sofia.bg

През последните няколко десетилетия проблемът с генерирането, депонирането и рециклирането на отпадъчни продукти в световен мащаб драстично се задълбочава, поради отделянето на все по-големи количества. Според данни на Евростат, България е на едно от първите места в ЕС по генериране и депониране на твърди отпадъци.

Замърсяването на обекти от околната среда с потенциално токсични елементи от отпадъчни продукти е сериозен екологичен проблем, което налага точен и прецизен контрол. Съставът на отпадъчни продукти, генерирани от производствени и битови процеси е често непредсказуем. Един от най-предпочитаните методи е ICP-MS, поради възможността за мултиелементен анализ в широк концентрационен интервал, ниски граници на откриване и висока точност и възпроизводимост.

В настоящото изследване се представят възможностите на полуколичествен ICP-MS анализ като бърз скрининг подход за охарактеризиране на течни и твърди отпадъци. Подходът предлага сериозни предимства като бързина, добра точност и калибриране с единичен стандартен разтвор с редуциран брой елементи, което значително опростява аналитичния процес.

Благодарности

В тези изследвания е използвано оборудване на Разпределената научна инфраструктура ИНФРАМАТ, част от Националната пътна карта на България за научна инфраструктура, подкрепена финансово от Министерство на образованието и науката.

Изследванията са част от проект BG05M2OP001-1.002-0019: „Чисти технологии за устойчива околна среда – води, отпадъци, енергия за кръгова икономика“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

**СЕКЦИЯ
НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ**

Яна Димитрова, ФХФ - СУ

Кристиян Веселинов, ИОНХ - БАН

Елжана Енчева, ФХФ - СУ

Весела Стоянова, ИЕЕС - БАН

НОВИ КОМПЛЕКСИ НА ЛАНТАНОИДИ С 2-(ФЕНИЛЕТИНИЛ)-1,10-ФЕНАНТРОЛИН

Яна Димитрова¹, Деница Еленкова¹, Румен Ляпчев², Йоана Захариева¹,
Бернд Моргенщерн³, Деян Димов⁴

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Неорганична Химия,
пощенски адрес бул. "Джеймс Баучер" №1, e-mail: yanadim123@gmail.com

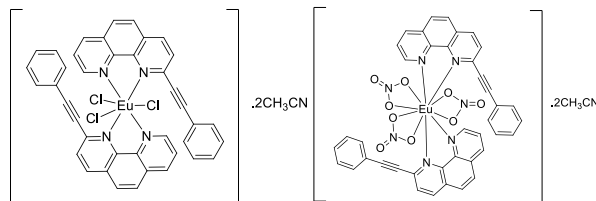
² СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Органична Химия,
пощенски адрес: бул. "Джеймс Баучер" №1

³ Университет на Саарланд, Катедра по Химия на Твърдото тяло,
пощенски адрес: 66123 Саарланд, сграда С4.1

⁴ ИОМТ-БАН, ул. акад. Г. Бончев“ 109

Синтезирани са комплекси с лиганд 2-(фенилетинил)-1,10-фенантролин (L) и Ln(III) йони (Ln = Eu, Tb, Dy, Sm, Gd) с цел подобряване на луминесценцията от лантаноидните йони¹. При синтезите са използвани хлориди на лантаноидите, като в случая на Eu(III) и Gd(III) са проведени синтези и със съответните нитрати.

Получените прахови проби са подложени на допълнителни анализи за определяне на структурата и оптичните им свойства. Изолираните монокристали на два от комплексите Eu(L)₂Cl₃·2CH₃CN (Eu1) и Eu(L)₂(NO₃)₃·2CH₃CN (Eu2) показват, че координационната сфера е допълнена с хлоридни и нитратни лиганди (фиг.1).



Фиг. 1. Схема на структурата на комплекси Eu1 и Eu2

Наблюдавани са характеристични емисионни преходи при комплексите с Eu(III) и Sm(III)⁴. Сравнени са флуоресцентните свойства на двата европиеви комплекса⁵.

Благодарност: Авторите изразяват благодарност за финансовата подкрепа на проект № КП-06-НЗ9/1 финансиран от Фонд „Научни изследвания“

В тези изследвания е използвано оборудване на Разпределената научна инфраструктура **ИНФ-РАМАТ**, част от Националната пътна карта на България за научна инфраструктура, подкрепена финансово от Министерство на образованието и науката.

Цитати:

- (1) Roza Maouche et al., *Inorganica Chim. Acta* 2020, vol. 501 (0), 119309.
- (2) Akerboom et al., *Eur. J. Inorg. Chem.* 2013, 6137-6146.
- (3) Xu, C. *Monatshefte für Chemie* 2010, vol. 141 (6), 631-635.
- (4) Petoud, S., *Chim. Int. J. Chem.* 2009, vol. 63 (11), 745-752.
- (5) Binnemans, K., *Coord. Chem. Rev.* 2015, vol. 295, 1-45.

ЛИТИЕВО МАНГАНОВ СУЛФАТ КАТО ЕЛЕКТРОД ЗА ЛИТИЕВО-ЙОННИ БАТЕРИИ

Кристиян Веселинов, Деляна Маринова, Мария Калъпсъзова, Екатерина Жечева

Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките, ул. „Акад. Г. Бончев“ бл. 11, 1113 София, България, k_veselinov@svr.igic.bas.bg

В наши дни литиево-йонните батерии се превърнаха в незаменима част от ежедневието ни, израз на което е Нобеловата награда по химия за 2019 г. Механизмът на действие на батерията се състои в протичането на обратима интеркалация на Li^+ между катода и анода. Най-изследваните до сега електродни материали са смесени оксиди на лития и преходните метали (кобалт, никел и манган). През последните години, като алтернатива на оксидните електродни се разглеждат двойните соли на лития и преходните метали. Предимството на тези съединения пред оксидите е, че потенциалът на интеркалация на Li^+ йони може да се контролира не само чрез вида на преходнометалните йони, но и чрез природата на полианионната група (фосфатна, сулфатна, боратна или силикатна). От всички известни съединения, с най-висок потенциал се отличават сулфатните соли.

Настоящите изследвания са насочени към разработването на нов, лесен и възпроизводим метод на синтез на литиево манганов сулфат като катоден материал за литиево-йонни батерии. Методът се състои в получаване на кристалохидратен прекурсор и последваща дехидратация [1]. Електрохимичното охарактеризиране на сулфатите се извършва в моделни литиево-йонни клетки с неводен електролит. Целта на тази работа е да се намерят материали с по-добри характеристики по отношение плътност на енергията, капацитет, работа на батерията при високи скорости, безопасност и не на последно място цена.

Благодарност: Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проект КП-06-Китай/8 - програми за ДВУСТРАННО СЪТРУДНИЧЕСТВО–БЪЛГАРИЯ–КИТАЙ на Фонд Научни Изследвания.

Цитати:

I. D. Marinova, V. Kostov, R. Nikolova, R. Kukeva, E. Zhecheva, R. Stoyanova, *Chem. Commun.*, 2018, vol. 54, 5466-5469.

ВЛИЯНИЕ НА Dy^{3+} ВЪРХУ ФАЗОВИЯ СЪСТАВ И КРИСТАЛНАТА СТРУКТУРА НА $Lu_2Mo_3O_{12}$

Елжана Енчева, Мартин Цветков, Мария Миланова

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Неорганична химия, бул. Джеймс Баучер №1, 1164 София,
mptsvetkov@gmail.com*

Лантаноидните молибдати с обща формула $Ln_2(MoO_4)_3$ представляват голяма група неорганични съединения с множество потенциални приложения благодарение на многообразните им свойства (оптични, електронни, магнитни, отрицателен КТР и т.н.). Те могат да се разделят на четири групи според кристалната им структура, които все още не са добре изучени и сред авторите все още няма единно мнение по въпроса. В началото на 2021 г. беше публикувана фазова диаграма на $Ln_2(MoO_4)_3$ като функция на йонния радиус на Ln^{3+} и температурата на наляване, но в нея липсва представителят на най-тежкия лантаноид $Lu_2(MoO_4)_3$ [1].

Настоящата работа проследява влиянието на синтетичната температура и съдържанието на $Dy(III)$ върху фазовия състав и полиморфната модификация на $Lu_{2-x}Dy_x(MoO_4)_3$ ($x = 0-1$). Получените образци са охарактеризирани с помощта на прахова рентгенова дифракция като дифрактограмите са обработени с метод на Rietveld и/или Le Bail. Установени са кристалографските параметри на системата $Lu_{2-x}Dy_x(MoO_4)_3$ като функция на съдържанието на $Dy(III)$ и температурата на наляване.

Благодарности: Изследванията са финансирани от Фонд „Научни изследвания“ чрез Договор КП-06-М39/3

Литература:

1. V. Popov et al., Solid State Sciences, 2021, vol 112 106518

ИЗСЛЕДВАНЕ НА Ti-ДОТИРАНИ BaCeLaO_{3-δ} КЕРАМИКИ

В. Стоянова^{1,2}, О. Костадинова¹, В. Желев¹, Е. Младенова¹, П. Петков², Т. Петкова¹

¹ *Институт по Електрохимия и Енергийни системи „Акад. Е. Будевски“ - БАН, секция „Материали за енергия“, Бул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 10, София, 1113, България, e-mail vesi.b.stoyanova@abv.bg*

² *Химикотехнологичен и металургичен университет, Факултет по химични технологии, катедра “Физика“, ул. „Климент Охридски“ № 8, 1756, София, България*

Твърдооксидните горивни клетки са сред най-обещаващите източници на възобновяема енергия. Съвременните усилия са насочени към намаляване на работната температура, като същевременно се увеличи ефективността. За постигане на тези цели, вниманието е насочено към електролитният материал, който е един от най-важните компоненти и който трябва да отговаря на редица изисквания като бърза йонна проводимост, химическа и механична стабилност в среднотемпературния диапазон (400-700°C).

В търсене на подходящи материали е изследвана перовскитната BaCe_{0.8-x}Ti_xLa_{0.2}O_{3-δ} система, където $0 \leq x \leq 0.3$ mol%. Образците са получени при високотемпературно синтероване с предварителна механохимична обработка. Кристалографската им структура е анализирана чрез рентгенова дифракция, която показва наличие на няколко фази, а молекулната организация е изучена с ATR-инфрачервена спектроскопия. Изследвана е йонната проводимост с електрохимичната импедансна спектроскопия. Резултатите показват много добра кислородна проводимост, в съчетание с подходяща структура.

Ключови думи: система BaCeTiLaO_{3-δ}, електрохимична импедансна спектроскопия, йонна проводимост, инфрачервена спектроскопия;

Благодарности: Авторите са признателни за финансовата помощ на Министерство на образованието и науката по ННП „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита – ЕПЛЮС“, договор № D01-214/2018.

СЕКЦИЯ ФИТОХИМИЯ И ФАРМАКОГНОЗИЯ

Христо Петков, ИОХЦФ - БАН

Емине Саралиева, УХТ

Ралица Чимширова, ИОХЦФ - БАН

Виктория Иванова, ИОХЦФ - БАН

Иван Лаловски, ФХФ - СУ

Диана Младенова, ИОХЦФ - БАН

Димана Близнашка, ИОХЦФ - БАН

Асен Стоянов, ФХФ - СУ

Венелина Ангелкова, ФХФ - СУ

ЕКСТРАКЦИЯ НА БИОАКТИВНИ ВЕЩЕСТВА ОТ ОБИКНОВЕН ГЛОГ С ПРИРОДНИ ДЪЛБОКО ЕВТЕКТИЧНИ СМЕСИ

Христо Петков, Боряна Трушева, Вася Банкова

Институт по органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките, ул. „Акад. Г. Бончев”, бл. 9, 1113 София, България, e-mail:

Hristo.Petkov@orgchm.bas.bg

Дълбоко евтектичната смес (ДЕС) се дефинира като комбинация от два или три компонента, които могат да образуват водородна връзка помежду си. В резултат имаме течна система, която е с по-ниска точка на топене от тази на всеки един от отделните компоненти [1]. При определена комбинация и съотношение природни съединения в твърдо състояние също могат да се превърнат в течности и да образуват т. нар. природни дълбоко евтектични смеси (ПДЕС). Те са невъзпламеними, нетоксични, биоразградими и безопасни за околната среда [2].

Глогът е лечебно растение, като листата и цветовете му съдържат разнообразни класове биологично активни вещества, поради което се използват традиционно с лечебна цел в народната и официалната медицина под формата на различни екстракционни продукти. Предлагащата в търговската мрежа тинктура от обикновен глог, съдържа висок процент етанол, който представлява опасност за страдащите от редица заболявания, както и за бременни жени и кърмачки. Тази токсичност на алкохола налага търсенето на алтернативни разтворители за екстракция.

Получени са 9 на брой ПДЕС, които са приложени като екстрагенти за извличането на вторични метаболити от търговска проба глог (сухи листа и цветове). За референтни екстрахиращи агенти са използвани: вода, 50%-ен и 70%-ен етанол. Чрез извличане с ултразвук са получени 12 екстракта, които са анализирани. Определено е съдържанието на тоталните феноли и флавоноиди в екстрактите. От гледна точка на извлечените общи феноли комбинацията холин хлорид/карбамид/вода 1:1:6 показва съпоставими резултати с водно-алкохолните разтвори (49 mg GAE/g). Изследването на антиоксидантния потенциал на извлеките доказва силните радикал-инхибиращи и желязоредуциращи свойства на екстракта, получен със сместа холин хлорид/карбамид/вода, които са идентични с тези на водно-алкохолните екстракти. Всичко това доказва приложението на тази ПДЕС като „зелена” алтернатива на токсичния екстрагент етанол.

Настоящото изследване е финансирано от МОН чрез Националната научна програма „Млади учени и постдокторанти”, РМС № 577/17.08.2018.

Цитати:

1. Luiz S. Longo Jr., Marcus V. Craveiro, *J. Braz. Chem. Soc.*, 2018, vol. 29, 1999-2025.
2. Yuntao Dai et al., *Anal. Chim. Acta*, 2013, vol. 776, 61-68.

**ФИТОХИМИЧЕН ПРОФИЛ, АНТИОКСИДАНТНА,
АНТИМИКРОБНА И АЦЕТИЛХОЛИНЕСТЕРАЗА ИНХИБИРАЩА
АКТИВНОСТ НА ЕТЕРИЧНО МАСЛО ОТ КОРЕНИ НА CARLINA
ACANTHIFOLIA ALL. (CARLINAЕ RADIX)**

Емине Саралиева¹, Ивайла Динчева², Юлиан Тумбарски³,
Надежда Петкова¹, Иван Иванов¹

¹Катедра “Органична химия и неорганична химия”, Университет по хранителни технологии, бул. Марица 26, Пловдив, 4002, e-mail: petkovanadejda@abv.bg (Н.П.); emit0969696@gmail.com (Е.С.); ivanov_ivan.1979@yahoo.com (И.И.)

²Катедра “Микробиология” Университет по хранителни технологии, бул. Марица 26, Пловдив, 4002, e-mail: tumbarski@abv.bg

³АгроБиоИнстиут, ССА, бул. Драган Цанков 8, ет. 4, София 1164, България, e-mail: ivadincheva@yahoo.com

Род *Carlina* (Сложноцветни) обхваща над 30 вида, които се срещат в естествените им местообитания в Европа и Азия. Растенията от рода *Carlina* са известни с използването им в етнофармакологията. Използваната част от *Carlina acanthifolia* All. в етнофармакологията е коренът, известен като *Carlinae radix*. Това лечебно растение се използва в народната медицина под формата на тинктури и отвара от корените за лечение на инфекции на пикочните пътища, кожни заболявания и зарастване на рани. Настоящото изследване се фокусира върху изследване на химичния профил и фармакологичните свойства на етеричното масло изолирано от корени на *C. acanthifolia*, отглеждани в България. Изследвани са антиоксидантните, антимикробните свойства, както и инхибиращата активност на ацетилхолинестеразата. GC – MS анализът е използван за качествен анализ на компонентите в етеричното масло. В него са идентифицирани осем съединения. Основен компонент открит в маслото е бензил-2-фурилацетилен (карлина оксид) - 89,36% от общия йонен ток (ОЙТ). Идентифицирани са също и сесквитерпени - фарнезол (Z, E) - 2,05% от ОЙТ, фарнезол (Z, Z) - 1,95% от ОЙТ, транс-β-фарнезен - 1,82% от ОЙТ, α-куркумен - 1,16% от ОЙТ, γ -куркумен 1,04% от ОЙТ, β-сескифиландрен - 0,37% от ОЙТ, и бензалдехид - 1,42% от ОЙТ. Етеричното масло от *Carlinae radix* показва висока радикалулавяща активност (метод ABTS + ●) IC₅₀—86.2 ± 0.03 μL/mL. Резултатите, получени от антимикробния скрининг разкриват, че етеричното масло подтиска растежа на *Bacillus cereus* 52/CI1 (MIC -0,313 μg/mL), *Proteus vulgaris* (MIC -0,625 μg/mL), *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 (MIC -1,25 μg/mL), *Candida albicans* (MIC -1,25 μg/mL), *Listeria monocytogenes* (MIC -5,0 μg/mL), *Salmonella* sp. (MIC -5,0 μg/mL) и *Escherichia coli* ATCC 8739 (MIC -5,0 μg/mL), докато растежът на *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 9027 не се повлиява. Изследваното етерично масло значително инхибира активността на ацетилхолинестеразата (IC₅₀ 0,28 ± 0,03 μg/mL) при сравнение с галантамина (IC₅₀ 0,31 ± 0,05 μg/mL). Демонстрираните тук биологични свойства на изследваното етерично масло от *Carlinae radix* може да послужат като основа за последващи изследвания, при които да се установи и оцени въздействието му върху човешкото здраве и хранене.

ХИМИЧЕН СЪСТАВ НА ПРОПОЛИС ОТ СЛАБО ПРОУЧЕНИ РАЙОНИ НА МАРОКО

Ралица Чимширова¹, Амина Чакир², Милена Попова¹

¹ *Институт по органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 9, 1113 София, България, e-mail:*

Ralitsa.Chimshirova@orgchm.bas.bg

² *Лаборатория по приложна химия, Факултет на науките Semlalia, Университет Cadi Ayyad, Бул. Prince Mu Abdellah B.P. 2390, 40000, Маракеш, Мароко*

Прополисът (пчелен клей) е продукт с растителен произход, чиято основна и биологично активна съставка са растителни секрети, събрани от пчелите от повърхността на млади листа, пъпки и/или наранена кора на дървета. Известно е, че химичният му състав е различен и се определя от спецификата на флората в местата на неговото събиране от пчелите. Благодарение на разнообразната си биологична активност (антимикробна, антиоксидантна, противовъзпалителна и др.), той е широко използван в народната медицина и влиза в състава на редица препарати, предлагани в аптечната мрежа. При това, полезното му действие се дължи на различни по структура компоненти, което поражда необходимост от изследвания на състава и активността на проби от различни географски и климатични райони.

Анализирайки прополис от слабо проучени райони на Мароко е установен химичен състав, различен от този на изследвани досега проби [1]. Доказано е, че прополисът от южни райони принадлежи към нов тип, чийто растителен източник е кактусоподобен вид *Euphorbia* (най-вероятно латексът на ендемичните за Мароко *E. officinarum* subs. *echinus* и *E. resinifera*). Чрез ГХ-МС е установено наличие на тритерпени от различен структурен тип, вкл. 4-метил стероли. Посредством различни хроматографски методи са изолирани общо 17 съединения, идентифицирани чрез ЯМР, 11 от които новооткрити за прополис. Сред тях са характерни за видове *Euphorbia* макроциклични дитерпени, производни на ингола (латиранов тип), описвани като практически неактивни по отношение дразнещо кожата и лигавиците действие [2]. Изследванията са от значение с оглед възможностите за приложение на прополиса, тъй като латексът на кактусоподобни видове се отличава както с разнообразна биологична активност, така и с токсичност и неблагоприятен ефект върху кожата и лигавиците.

Цитати:

1. М. Popova et al., *Nat Prod Commun*, 2015, vol. 10 (11), 1961-1964
2. М. Hergenbahn et al., *J Cancer Res Clin Oncol*, 1984, vol. 108, 98-109

Настоящото изследване е финансирано от МОН чрез Национална научна програма „Млади учени и пост-докторанти“, РМС 577 / 17.08.2018.

ОПТИМИЗИРАНЕ НА УСЛОВИЯТА ЗА ЕКСТРАКЦИЯ НА БИОЛОГИЧНО АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА ОТ *INULA BRITANNICA*

Виктория Иванова¹, Антоанета Трендафилова¹

¹ *Институт по Органична химия с Център по Фитохимия,
БАН, Акад. Г. Бончев, бл. 9, 1113, София, България,
viktoria.genova@orgchm.bas.bg,
antoaneta.trendafilova@orgchm.bas.bg*

Лечебното растение *Inula britannica* (британски оман) се използва в народната медицина като противовирусно и антибактериално средство, за лечение на бронхити, възпаления и смущения в храносмилателната система. Установено е, че растението съдържа терпеноиди (сески- и тритерпеноиди и сескитерпенови лактони) и фенолни съединения (флавоноиди и фенолни киселини), отговорни за неговата биологична активност.

Целта на изследването е получаване на екстракти от *I. britannica* чрез микровълнова екстракция, проследяване влиянието на различни параметри (съотношение растителен материал/екстрагент, съотношение вода/етанол, време и температура) върху количеството на тоталните фенолни съединения и оптимизиране на екстракционните условия с Vox-Beheken дизайн. За количествено определяне на фенолните съединения е използван спектрофотометричен метод с реагент на Фолин-Чиколто.

Намерено е, че съотношението вода-етанол и температурата са двата фактора, които оказват най-съществено влияние върху количеството на фенолните съединения. Най-висок добив на фенолни съединения (45.81 мг/г РМ) е получен при съотношение растителен материал/екстрагент 1:20 с 50 % воден етанол при 75°C за 5 мин. Установено е, че микровълновата екстракция позволява по-добро извличане на тези съединения в сравнение с класическата мацерация (36.64 мг/г РМ).

Благодарности: Благодарности за финансовата подкрепа от Националната изследователска програма „Млади учени и докторанти“ одобрена от DCM 577/17/08/2018

ЛЕКАРСТВЕНИ ПРОДУКТИ БЕЗ ЛЕКАРСКО ПРЕДПИСАНИЕ (ОТС): ДЯЛ НА РАСТИТЕЛНИТЕ ЛЕКАРСТВЕНИ ПРОДУКТИ С АТС КОД R – ДИХАТЕЛНА СИСТЕМА

Иван Лаловски, Иван Свиняров, Анели Неделчева

*Софийски университет „Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация
бул. “Джеймс Баучер” 1, София 1164, ohil@chem.uni-sofia.bg*

В условията на пандемия една от препоръките на Световната здравна организация (СЗО) [1] и Министерство на здравеопазването (МЗ) [2] е спазването на социална дистанция. Избягването на посещение на лекарски кабинет и потенциален контакт с болни хора поставя въпроса за терапия, изключваща участието на лекар при простудни състояния или грип с по-леко изразени респираторни оплаквания. Лекарствените продукти (ЛП) без лекарско предписание (ОТС – over the counter) са възможно решение на този проблем.

Направеният анализ се фокусира върху определяне дела на растителните лекарствени продукти (РЛП) от общия брой на ОТС ЛП, регистрирани с АТС код R- дихателна система. За целта е използван актуалният „Списък на лекарствени продукти без лекарско предписание в Република България“ [3]. Направена е оценка на разпределението на РЛП по нивата на този код. Разгледани са фармацевтичните форми, под които са регистрирани. Определен е броят растителни видове, от които са получени разгледаните РЛП, както и каква част от тях са представители на българската флора. Направено е сравнение с посочената информация за растения източници на растителни вещества и растителни препарати, използвани за третиране на респираторни оплаквания в издания за традиционна медицина. С оглед на информацията в използваните източници може да се направи заключение, че е налице потенциал за създаването на нови РЛП.

Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проекта EXTREME, финансиран от МОН, D01-76 / 30.03.2021 г., чрез програма „Европейски научни мрежи“.

1. World health organization (WHO), Coronavirus disease (COVID-19) advice for the public 05.05.2021, <https://www.who.int/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019/advice-for-public> (accessed 05.05.2021)
2. Министерство на здравеопазването, Информация за коронавирус COVID-19 /за граждани и медицински специалисти 16.03.2020, <https://www.mh.government.bg/bg/informaciya-za-grazhdani/informaciya-otnosno-noviya-koronavirus-2019-ncov/> (accessed 05.05.2021)
3. Изпълнителна агенция по лекарствата (ИАЛ), Лекарствени продукти без лекарско предписание в Република България към дата 20.03.2021 г. https://www.bda.bg/images/stories/documents/new_registered/202102/OTC.pdf (accessed 05.05.2021)

ВЛИЯНИЕ НА ЕВОЛЮЦИОННОТО РАЗВИТИЕ ВЪРХУ ПРОДУКЦИЯТА НА ВТОРИЧНИ МЕТАБОЛИТИ ПРИ ВИДОВЕ КАНТАРИОН В ЕСТЕСТВЕНИ И *ИН ВИТРО* УСЛОВИЯ

Диана Младенова¹, Димана Близнашка¹, Виктория Иванова², Калина Данова²,
Ина Анева³, Антоанета Трендафилова²

¹Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, 1164 София, e-mail: di-
ana.spmladenova@gmail.com; dimana.bliznashka@yahoo.bg

²Институт по органична химия с център по фитохимия, Българска Академия на Нау-
ките, 1113 София, e-mail: trendaf@orgchm.bas.bg

³Институт по биоразнообразие и екосистемни изследвания, Българска Академия на
Науките, 1113 София, e-mail: ina.aneva@abv.bg

Жълтият кантарион (*Hypericum perforatum*) е добре познат както в традиционната, така и конвенционалната медицина със своите противовирусни, противомикробни, противовъзпалителни, ранозаздравяващи, противоракови и др. лечебни свойства, дължащи се на съдържащите се в растението флавоноиди (рутин, хиперозид и др.), антрахинонови (хиперицин и псевдохиперицин) и флороглуцинолови (хиперфорин) съединения. Освен *H. perforatum*, съществуват над 450 представителя на рода по целия свят. Проучванията показват, че съдържанието на хиперицин и псевдохиперицин силно зависи от еволюционното развитие на видовете от род *Hypericum*.

Целта на настоящото изследване е сравнителен спектрофотометричен анализ на съдържанието на флавоноиди и хиперицин в три вида *Hypericum*, характерни за нашата флора - *H. perforatum* (секция *Hypericum*), *H. tetrapterum* (секция *Hypericum*) и *H. richeri* (секция *Drosocarpium*). Сравнени са проби от растителен материал, събран от естествени находища, както и от *in vitro* култивирани растения.

Установено е, че количеството на хиперицин в две проби от *H. richeri*, събрани от естествените находища, значително надвишава това при другите два вида. При сравняването на двата представителя на секция *Hypericum*, *H. perforatum* показва по-добър потенциал за продукция на хиперицин в сравнение с *H. tetrapterum*, както при диворастящите, така и при *in vitro* отгледаните растения. Установено е също, че добавените с хранителната среда растежни регулатори оказват влияние върху съдържанието на хиперицин в *in vitro* отгледаните растения. По отношение на общото съдържание на флавоноиди, най-високо съдържание е намерено в *H. richeri*, събран от Рила, следван от *H. perforatum* и *H. tetrapterum*. Количеството на флавоноидните съединения в *in vitro* отгледаните растения *H. perforatum* е съизмеримо с това в диворастящото растение, за разлика от *in vitro* отгледаните *H. tetrapterum* и *H. richeri*.

Получените резултати показват, че *in vitro* отгледаните *H. perforatum*, *H. tetrapterum* и *H. richeri* могат да бъдат ценен източник на биологично-активни вещества. Те могат да са основа за по-задълбочени изследвания насочени към намиране на най-добри условия за натрупване на определен клас съединения.

Благодарности: Дог. номер КП-06-Н39, Фонд Научни Изследвания

ПРОУЧВАНЕ ВЪРХУ РАСТЕНИЯ ОТ КИТАЙСКАТА ТРАДИЦИОННА МЕДИЦИНА КАТО КОМПОНЕНТ В СЪВРЕМЕННИТЕ ФИТОПРОДУКТИ

Асен Стоянов, Анели Неделчева

*Софийски университет „Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация
бул. “Джеймс Баучер” 1, София 1164, assen.stoianov@gmail.com*

Стремежът към качествен и здравословен живот, заедно с процеса на глобализация и развитие на приоритетите на развитите общества, са в основата на засиления интерес в световен мащаб към употребата на фитопродукти и към традиционната медицина. В тази посока е и включването на традиционната китайска медицина (ТКМ) към Международната класификация на болестите (МКБ) на СЗО, която ще бъде прилагана след 2022 година. Участието на лечебни растения от ТКМ в растителни продукти е факт през последните години, който води до противоречиви реакции и поставя множество въпроси върху тяхната безопасна употреба, решаването на които изисква интегриран научен подход [1]. Цел на настоящето проучване е установяване на видовото разнообразие от растенията с азиатски произход (ТКМ), участващи като съставка във фитопродуктите, използвани в България. Използвани са общодостъпни бази данни с регистрирани растителни лекарствени продукти, традиционни растителни лекарствени продукти (ИАЛ) и хранителни добавки (БАБХ), както и международни бази данни за ТКМ (YaTCM) [2]. Установени са над 50 вида от ТКМ, формулирани и характеризирани са основните тематично функционални групи с моделни представители. Доминираща е групата на видовете, които за първи път се използват като компоненти във фитопродукти. Направен е сравнителен анализ с етноботаническите данни за използването на растения с азиатски произход в българската традиционна медицина [3].

Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проект 2901/КП-06-Китай/15/17.12.2020 г., финансиран от ФНИ-МОН, чрез програма за двустранно сътрудничество „България – Китай 2019“.

1. Wang, M., Franz, G. 2015. The role of the European Pharmacopoeia (Ph Eur) in quality Control of traditional Chinese Herbal Medicine in European member States, *World Journal of Traditional Chinese Medicine*, 1: 5-15.
2. Li, B., Ma, C., Zhao, X. et al. 2018. YaTCM: Yet another Traditional Chinese Medicine Database for Drug Discovery. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 16, 600-610.
3. Nedelcheva, A. 2012. Traditional knowledge and modern trends for Asian medicinal plants in Bulgaria from an ethnobotanical view. *EurAsian Journal of BioSciences*, 6, (7): 60-69.

ИЗСЛЕДВАНЕ МИКРОСТРУКТУРАТА НА ХИДРАТИРАНИ ПЛОДОВЕ ОТ *PRUNELLA VULGARIS* L.

Венелина Ангелкова*, Иван Свиняров, Анели Неделчева

Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Климент Охридски“
бул. Джеймс Баучър 1, София 1164.

*Автор за кореспонденция, e-mail: ohvma@chem.uni-sofia.bg

Структурата на растителното вещество *Prunellae spica* (Common selfheal fruit-spike, European Pharmacopoeia 10.0, 2439:01/2017), включва няколко морфологични части, като значителен дял от тях заемат плодовете. Видова специфичност е разположението на плодовете в неопадлива чашка (ценобии от четири орехчета - nutlets) и формирането на капсула (mucilage envelope) при наличие на влага, което е защитен еволюционен механизъм. Основната използвана форма за перорално приложение на растителната субстанция е запарка (infusion), в резултат на което настъпва хидратиране на плодовете и образуване на капсула. Биологичната роля на капсулата предполага антибактериална и антимикотична активност на съставлящите я химични компоненти, главно от полизахариден характер [1-2]. Филогенетичният фармакогностичен подход дава основание да се предположи подобна активност на хидратирани плодове от обикновена пришница.

Проведено е макроморфологично, микроскопско (LO, SEM) изследване върху структурата и функционалните характеристики на полизахаридната обвивка на хидратирани плодове. Проследена е динамиката на образуване на защитната обвивка. Представени са сравнителни данни с характеристиката на капсулата при *Salvia hispanica* (чия). Морфологичното и структурно охарактеризиране на фармакопейното растителното вещество *Prunellae spica* от български популации е принос към ефективно осъществяване на контрола за безопасна употреба на растителни продукти, включващи съставки от обикновена пришница.

Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проект 2901/КП-06-Китай/15/17.12.2020 г., финансиран от ФНИ-МОН, чрез програма за двустранно сътрудничество „България – Китай 2019“.

Цитати:

1. Wang, S.J., Wang, X.H. et al. 2019. *Prunella vulgaris*: A comprehensive review of chemical constituents, pharmacological effects and clinical applications. *Curr Pharm Des.* 25(3), 359–369.
2. Ferreira, B., Montesinos, D., Sales, F. 2020. Mucilage in Portuguese Lamiaceae, *Botany Letters*, 167:4, 430-438.

СЕКЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧНА ХИМИЯ

Гергана Симеонова, УМБАЛ "Света Марина" - Варна

Ивет Иванова, ХФ - ТТУ

Стиляна Колева, ХТМУ

Мария Аргирова, ИОХЦФ - БАН

Николай Лумов, ИОХЦФ - БАН

Куентин Радев, ИОХЦФ - БАН

ПРОИЗВОДСТВО И МОДИФИЦИРАНЕ НА РАДИОФАРМАЦЕВТИКА ^{18}F -ФЛУОРДЕЗОКСИ-ГЛЮКОЗА (^{18}F -FDG)

Гергана Симеонова^{1,2}, Боян Годоров², Валентина Любомирова²

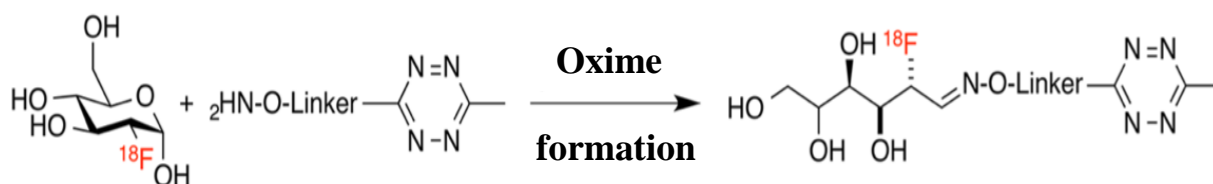
¹ УМБАЛ „Света Марина“, Кл. по Нуклеарна медицина, гр. Варна, бул. „Христо Смирненски“ №1, gerimm@abv.bg

² Факултет по химия и фармация, катедра Аналитична химия, гр.София, ул. „Джеймс Баучер“, vlah@chem.uni-sofia.bg

Радионуклидът ^{18}F е един от атрактивните позитронни емитери с период на полуразпад около 110 мин. Най-често изотопът се получава в циклотрон чрез бомбардиране с протони на обогатена на ^{18}O вода по следната ядрена реакция $^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$. Основно радионуклидът ^{18}F намира приложение за производството на ^{18}F -маркирани радиофармацевтици, използвани за нуждите на позитронемисионната томография (ПЕТ). Сред тях най-широко прилаганият в повечето ПЕТ-центрове е ^{18}F -флуордезоксиглюкозата (^{18}F -FDG).

^{18}F -FDG се използва за оценка на метаболизма на глюкозата в мозък и сърце, и също така за изследване на злокачествени тумори. Играе важна роля при планирането на лъчетерапия при патологии като рак на бял дроб, рак на глава и шия, рак на дебело черво. Този радиофармацевтик се синтезира чрез нуклеофилното радиофлуориране в Клиниката по Нуклеарна медицина към УМБАЛ „Света Марина“.

Освен като основен и универсален ПЕТ-радиофармацевтик ^{18}F -флуордезоксиглюкозата през последните години се използва и като простетична група за индиректно радиофлуориране на биомолекули като пептиди и протеини при сравнително меки реакционни условия, което дава възможност за разработване и синтезиране на повисокоспецифични ПЕТ-радиомаркери. Разработен е метод за модифициране на синтезираното в клиниката ^{18}F -FDG посредством образуването на оксимна химична връзка с бифункционално съединение.



Авторите са благодарни за оказаната подкрепа от Фонд Научни Изследвания към Министерство на Образованието и Науката (договор № КП-06-Н29/4).

СИНТЕЗ НА НОВИ НАПРОКСЕНОВИ ПРОИЗВОДНИ НА ИЗОХИНОЛИНА И БЕТА-КАРБОЛИНА

Ивет Иванова, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов

Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, Катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24, Пловдив, 4000,
e-mail: manolov@uni-plovdiv.net

Напроксен или 2-(6-метоксинафтален-2-ил) пропановата киселина спада към групата на нестероидните противовъзпалителни средства. Прилага се при лечение на болка, менструални спазми и възпалителни заболявания като ревматоиден артрит, подагра, треска и др. От друга страна изохинолиновите и β -карболиновите алкалоиди са известни с широкия спектър от биологични активности. В тази връзка интерес представлява получаването на съединения обединяващи напроксеновия скелет с изохинолиновата и β -карболиновата структура. Успешно са извършени задачите представени в схема 1, а именно, получаване на амиди **2** и последваща циклизация до получаването на 1,2,3,4-тетрахидроизохинолинови и β -карболинови съединения **3**.

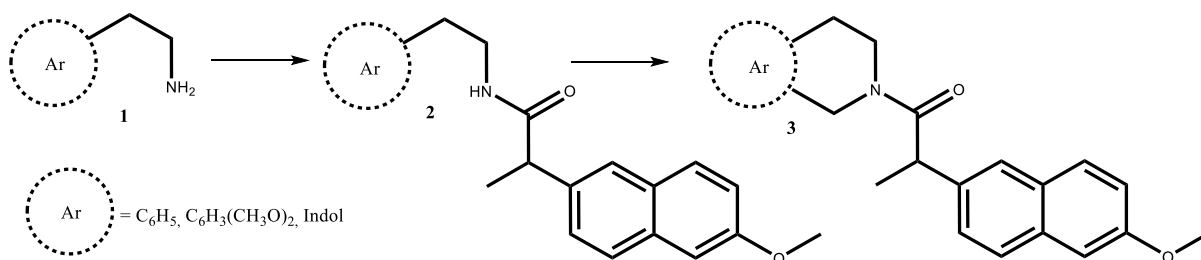


Схема 1. Получаване на напроксенови производни.

За реализиране на последната стъпка от така представената схема бе приложена реакция на вътрешномолекулно α -амидоалкилиране с използване на хетерогенен киселинен катализатор PPA/SiO₂. Получените производни на 1,2,3,4-тетрахидроизохинолина и β -карболина **3** са интересни с оглед изследване на тяхната биологичната активност. Всички новополучени вещества са нови съединения (Reaxys) и са спектрално охарактеризирани.

Благодарности: Проект КП-06-M29/1

КОНДЕНЗИРАНИ ТРИАЗИНОБЕНЗИМИДАЗОЛИ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ И АНТИХЕЛМИНТНА АКТИВНОСТ

Ст. Колева¹, К. Аничина¹, Д. Вучев², М. Аргирова³, Н. Лумов³, Д. Янчева³

¹ Химикотехнологичен и металургичен университет, катедра „Органичен синтез и горива“, бул. Климент Охридски 8, 1756 София, e-mail: stillyana.k@abv.bg (Ст.К.), kameliya_anichina@uctm.edu (К.А)

² Медицински университет – Пловдив, катедра “Инфекциозни болести, паразитология и тропическа медицина“, бул. „Васил Априлов“ 15А, 4002, e-mail: vutchev_d@abv.bg

³ Институт по органична химия с Център по фитохимия – Българска академия на науките, Лаборатория „Структурен органичен анализ“, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 9, 1113 София, e-mail: margirova@orgchm.bas.bg (М.А.), schinzi@gmail.com (Н.Л.), deni@orgchm.bas.bg (Д.Я.)

Бензимидазоловите антихелминтици – albendazole и mebendazole се характеризират с висок терапевтичен индекс, широк спектър на действие и ниска себестойност, поради което се прилагат за индивидуална и масова химиотерапия [1]. Поради широката им и продължителна употреба, в практиката все по-често се наблюдава хелминтна резистентност спрямо тях и преодоляването и обуславя разработване на нови биологично активни съединения с аналогично действие [2].

Тук, ние представяме синтеза на серия от кондензирани триазинобензимидазоли, съдържащи различен хетероциклен фрагмент в 4-позиция на 3,4-дихидро[1,3,5]триазино[1,2-а]бензимидазоловата хетероциклена система. Структурите на съединенията бяха доказани с ИЧ, ¹H ЯМР и ¹³C ЯМР спектри, а в допълнение геометриите на молекулите бяха оптимизирани чрез теоретични квантово-химични изчисления.

Триазинобензимидазолите бяха подложени на *in vitro* скрининг за антихелминтна активност срещу мускулни ларви на *Trichinella spiralis*. Някои от съединенията показаха ларвоциден ефект, значително по-висок от този на контролата – albendazole и представляват интерес за по-нататъшни паразитологични проучвания.

Благодарности: Работата е реализирана като част от Национална програма „ЕВРОПЕЙСКИ НАУЧНИ МРЕЖИ“ на Министерството на науката и образованието на България, проект „Drug molecule“ D01-278 / 05.10.2020.

Цитати:

1. A. Montresor et al., PLoS Negl. Trop. Dis., 2020, vol. 14(8), e0008505
2. J. Krücken et al, Int J Parasitol Drugs Drug Resist., 2017, vol. 7(3), 262–271.

НОВИ 1H-БЕНЗИМИДАЗОЛ-2-ИЛ- ХИДРАЗОНИ С АНТИРАДИКАЛОВА, АНТИПРОЛИФЕРАТИВНА АКТИВНОСТ И МОДУЛИРАЩ ЕФЕКТ ВЪРХУ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯТА НА ТУБУЛИН

Мария Аргирова¹, Георги Момеков², Надя Христова-Авакумова³, Мая Гунчева¹, Емилия Чернева², Камелия Аничина⁴, Деница Янчева¹

¹ *Институт по органична химия с Център по фитохимия, Лаб. СОА, Ул. Акад. Г. Бончев, Бл. 9, 1113, София, Maria.Argirova@orgchm.bas.bg*

² *Медицински Университет, Факултет по Фармация, ул. Дунав 2, 1000 София, gtmekov@gmail.com*

³ *Медицински Университет, Факултет по Медицина, Катедра по медицинска физика и биофизика, ул. Здраве 2, 1431, София, nadia_hristova@abv.bg*

⁴ *Химикотехнологичен и металургичен университет, Катедра "Фин органичен синтез", Бул. "Св. Климент Охридски" 8, 1756, София, kameliya_anichina@uctm.edu*

Бензимидазола е хетероароматна система, чиито разнообразни структурни модификации осигуряват разработването на клинично полезни агенти с биологична активност. От друга страна, 2-аминобензимидазоллил фармакофорът е градивен елемент на познати химиотерапевтични лекарства [1] като комбинирането му с хидразинов фрагмент води до получаването на съединения с висока активност срещу различни клетъчни линии като МВ-231, НТ-29, HeLa и Нер G2 [2], както и съединения с потенциална антиоксидантна активност [3].

В хода на изследванията ни синтезирахме серия незаместени и метилно заместени 2-аминобензимидазоллил хидразони. Изследвахме тяхната цитотоксичност спрямо клетъчните линии MCF-7 и AR-230, радикал-улавящата им способност спрямо стабилни радикали АВТС и DPPH, както и протективният им ефект върху моделни системи на биологично значими молекули като дезоксирибоза и лецитин. В допълнение, изследвахме и влиянието на хидразоните върху полимеризацията на тубулин. Въвеждането на заместители в бензимидазоловия хетероцикъл, както и във фенилния остатък, даде възможност да се оцени ролята им за проявената биологична активност.

Благодарности: Изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на Фонд „Научни изследвания“, проект КП-06-Н39/4.

Цитати:

1. Y. Bansal, O. Silakari, *Bioorg. Med. Chem.*, 2012, vol. 20, 6208-6236
2. A. Ts. Mavrova, D. Wesselinova, N. Vassilev, *Eur. J. Med. Chem.*, 2013, vol. 63, 696-701
3. N. Anastassova, D. Yancheva, A. Mavrova, *J. Mol. Struct.*, 2018, vol. 1165, 162-176

СИНТЕЗ И СТРУКТУРНО ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА НИТРОАРОМАТНИ БЕНЗИМИДАЗОЛОВИ ПРОИЗВОДНИ С ПОТЕНЦИАЛНА ПРЕДЛЕКАРСТВЕНА АКТИВНОСТ

Николай Лумов¹, Деница Янчева¹, Симеон Стоянов¹, Камелия Аничина²

¹ *Институт по органична химия с център по фитохимия-БАН, 1113*

² *Химикотехнологичен и металургичен университет - София, 1756*

e-mail на докладчика: Nikolay.Lumov@orgchm.bas.bg

Много медицински и фармацевтични проучвания изследват съединения, съдържащи нитро група заради свойството ѝ да претърпяват биоредукция под действието на ензими наречени нитроредуктази, превръщайки се в анион радикали, които в безкислородна среда продуцират цитотоксични агенти. Благодарение на тази способност редица нитро производни са се утвърдили като лекарства с антинеопластично, антибактериално и антипаразитно действие. Голяма част от тези лекарства са нитроимидазолови производни, а бензимидазоловата структура също е доказала потенциала си за разработване на биологично активни съединения [1, 2].

Синтезирани бяха серия нитроароматни съединения с *1,3-триазоло[3,2-а]бензимидазол-3(2H)онов* скелет. С помощта на кванто-химични изчисления бяха охарактеризирани пространствения строеж на неутралните съединения и техните радикал аниони, промените в електронната структура, които настъпват при превръщането в радикал аниони и склонността на съединенията към нитроредукция. Изследваните по теоретичен път афинитети са близки или по-високи от тези на известни нитро лекарства. Въз основа на изчислените параметри, може да се обобщи, че изследваните 2-(не)заместени *1,3-триазоло[3,2-а]бензимидазол-3(2H)они* притежават много обещаващи свойства за разработване на биоредуциращи се предлекарства.

Цитати:

[1]. K. Nepali, H. Lee, and J., Nitro-Group-Containing Drugs, Journal of Medicinal Chemistry (2019) 62 (6), 2851-2893

[2] S. Patterson, S. Wyllie, Nitro drugs for the treatment of trypanosomatid disease: past, present and future prospects, Trends parasitol., vol 30 (2014) 289-298

Благодарности:

Изследванията са проведени с финансовата подкрепа на Фонд „Найчни изследвания“, проект КП-06-Н39/4. В част от изследванията е използвано оборудване на ИНФРАМАТ (Изследователска инфраструктура от Националната пътна карта на РБ), подкрепено със средства на Договор DO1-284/17.12.2019 с МОН.

СИНТЕЗ НА ХИДРАЗОНОВИ ПРОИЗВОДНИ НА ИНДОЛА И *IN VITRO* ИЗСЛЕДВАНЕ НА МОДУЛИРАЩ ЕФЕКТ ПРИ ЖЕЛЯЗО-ИНДУЦИРАНО ОКСИДАТИВНО УВРЕЖДАНЕ

Квентин Радев¹, Неда Анастасова¹, Надя Христова-Авакумова², Деница Янчева¹

¹ *Институт по органична химия с център по фитохимия, Българска академия на науките, 1113 София, e-mail: quentin.radev@orgchim.bas.bg*

² *Катедра по медицинска физика и биофизика, Медицински факултет, Медицински университет - София, 1431, София*

Установено е, че оксидативният стрес стои в основата на процеси, водещи до развитие на сериозни патологични увреждания, като рак и невродегенеративни заболявания. В условията на оксидативен стрес се иницира липидна пероксидация на полиненаситени мастни киселини и се генерират продукти с мутагенни и канцерогенни свойства, като малондиалдехид (МДА). Досегашната ни работа върху синтеза и изследването на функционализирани хидразонові производни на бензимидазола с комбинирано терапевтично и антиоксидантно действие показва обещаващи резултати за разработване на нови лекарствени кандидати.^{1,2}

Текущото изследване е мотивирано от неотдавна установеният потенциал на индола и неговите производни, съдържащи ароматни хетероцикли, за лечение на невродегенеративни заболявания.³ Синтезирана е нова серия индолови хидразонові производни, съдържащи хидроксилни и метоксилни групи, и са изследвани свойствата им да инхибират липидна пероксидация върху биологично значими системи (лецитин и дезоксирибоза) в условията на желязо-индуцирано оксидативно увреждане. От получените резултати се наблюдава, че всички съединения показват протективни свойства в различна степен, в зависимост от заместителите.

Молекулната геометрия и електронната структура са изследвани чрез спектроскопски и теоретични методи. Най-вероятните механизми на радикал-улавяне – пренос на водороден атом (HAT), пренос на единичен електрон (SET) и електронен трансфер с последователна загуба на протон (SPLET), са пресметнати с DFT методи.

Цитати:

1. N. Anastassova, D. Yancheva, N. Hristova-Avakumova, V. Hadjimitova, V., Traykov, T., Aluani, D., Tzankova, V., Kondeva-Burdina, *Pharmacol. Rep.*, 2020, vol. 72, 846–856.
2. N. Anastassova, D. Aluani, A. Kostadinov, M. Rangelov, N. Todorova, N. Hristova-Avakumova, M. Argirova, N. Lumov, M. Kondeva-Burdina, V. Tzankova, D. Yancheva, *Neural. Regen. Res.* Vol. 16(11):2299-2309.
3. S. Mimori, K. Kawada K, Saito R, et al. *Biochem Biophys Res Commun.* 2009, vol. 517(4), 623-628.

Благодарности: Тази работа е осъществена с финансовата подкрепа на Фонд „Научни изследвания“, младежки проект № КП-06-М-49/3.

СЕКЦИЯ ОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Анна-Мария Златанова, ФХФ - СУ

Момчил Бенов, ИОХЦФ - БАН

Дияна Димитрова, ХФ - ПУ

Теодора Тодорова, ХФ - ПУ

Христо Манов, ФХФ - СУ

Моника Мутовска, ФХФ - СУ

Нина Русева, МУ - София

Любен Бориславов, ФХФ - СУ

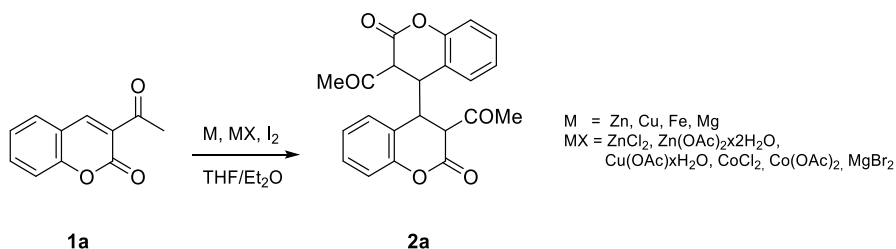
ВЛИЯНИЕ НА ЗАМЕСТИТЕЛИТЕ В КУМАРИНОВИЯ ПРЪСТЕН В РЕАКЦИИ НА ДИМЕРИЗАЦИЯ НА 3-АЦЕТИЛКУМАРИН

Анна-Мария Златанова, А. Колева, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Органична химия и фармакогнозия, e-mail: an.zlatanova@gmail.com

През последните години интерес представляват голям брой природни и синтетични бискумаринови производни за участието им в редица биохимични процеси² с цел разработване на ефективни противотуморни препарати. Като пример може да се посочи инхибиращото действие на някои представители от тази група спрямо редица ензими като кинази, теломеразы, уреазы, интегразы, ДНК-полимеразы, имащи важно значение при процесите на развитие на туморите и разпространението на раковите клетки.

В литературата са описани много малко синтетични подходи за получаването на този клас кумарини, като по-голямата част от представените методи са многостъпкови синтези, електрохимична редукция или електроредукция/хидриране² Недостатъците на изброените методи са дългото реакционно време, незадоволителните добиви или сложната апаратура необходима за осъществяване на взаимодействието.



Настоящите изследвания представят нов синтетичен подход за получаване на бискумаринови системи с използване на метални соли. Като моделно съединение е използван 3-ацетилкумарин **1a** и негови заместени производни.

Изследванията са финансирани по договор № 2877 НИС при СУ, КП-06-Н39/17 от 17.12.2019г.; Авторите изказват благодарност на проект „EXTREME“, финансиран от Министерството на образованието и науката по Национална програма „Европейски научни мрежи“; А. К. изказва благодарност за получената финансова подкрепа от програмата на МОН „Млади учени и постдокторанти“ (изходящо писмо 95/20.12.2019).

1. B. Y. Park, B. S. Min, S. R. Oh, J. H. Kim, K. H. Bae, H. K. Lee, *Phytother. Res.* **2006**, *20*, 610; G. A. Cordell, *J. Nat. Prod.* **1984**, *47*, 84; H.-C. Chen, C.-K. Chou, Y.-H. Kuo, S.-F. Yeh, *Biochem. Pharmacol.* **1996**, *52*, 1025; H. Y. Zhou, J. L. Hong, P. Shu, Y. J. Ni, M. J. Qin, *Fitoterapia* **2009**, *80*, 283.
2. Hussain, H.; Hussain, J.; Al-Harrasi, A.; Krohn, K. *Tetrahedron*, **2012**, *68*, 2553-2578

СИНТЕЗ НА НОВИ ДИАРИЛЕТЕРИ И ИЗУЧАВАНЕ НА ТЯХНАТА *IN VITRO* АНТИВИРУСНА АКТИВНОСТ

Момчил Бенов¹, доц. д-р Георги Добриков¹,
гл. ас. д-р Ивайло Славчев¹, доц. д-р Иванка Николова²

¹ *Институт по органична химия с център по фитохимия - БАН,
гр. София 1113, ул. „Акад. Георги Бончев“, бл. 9, totchil.benov@orgchm.bas.bg*

² *Институт по микробиология „Стефан Ангелов“ - БАН,
гр. София 1113, ул. „Акад. Георги Бончев“, бл. 26, vanianik@mail.bg*

Синтезирана е серия от 13 нови диарилетери - аналози на антивирусния агент MDL-860. Всички диарилетери са пречистени и охарактеризирани. Те съдържат 2-циано-4-нитрофенилов остатък в молекулите си.

Направена е количествена оценка на активността им срещу някои типове вируси (полиовирус 1, коксакивирус В1, коксакивирус В3, човешки аденовирус 5, херпес HSV-1 и коронавирус ОС43). Няколко от новополучените съединения показват висока *in vitro* активност срещу поне един от тестваните вируси в съчетание с много ниска цитотоксичност към човешки клетки. Постигнати са индекси на селективност (SI) над 20 при няколко от съединенията, като за едно от тях SI=99.7 спрямо човешки аденовирус 5. Не се забелязва широкоспектърна антивирусна активност при нито едно съединение.

Цитати:

1. Arita, M., Dobrikov, G., Pürstinger, G. and Galabov, A.S. (2017). Allosteric Regulation of Phosphatidylinositol 4-Kinase III Beta by an Antipicornavirus Compound MDL-860. *ACS Infectious Diseases*, 3(8), pp.585–594.
2. Dobrikov, G.M., Slavchev, I., Nikolova, I., Stoyanova, A., Nikolova, N., Mukova, L., Nikolova, R., Shivachev, B. and Galabov, A.S. (2017). Synthesis and anti-enterovirus activity of new analogues of MDL-860. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 27(19), pp.4540–4543.
3. Galabov, A.S. and A. Angelova, Antiviral agents in the prevention and treatment of virus-induced diabetes. *Anti-Infective Agents in Medicinal Chemistry*, 2006. 5(3): p. 293-307.
4. Galabov, A.S., B.S. Galabov, and N.A. Neykova, Structure-activity relationship of diphenylthiourea antivirals. *Journal of Medicinal Chemistry*, 1980. 23(9): p. 1048-1051.
5. Galabov, A.S., et al., Perspectives for effective chemotherapy of enterovirus infections, in *New Trends of Microbiology (65th Anniversary of the Stephan Angeloff Institute of Microbiology)*, H. Najdenski, M. Angelova, and S. Stoitsova, Editors. 2012, *The Stephan Angeloff Institute of Microbiology, Bulgarian Academy of Sciences*: Sofia, Bulgaria. p. 47-81.
6. Nikolova, I., Slavchev, I., Ravutsov, M., Dangalov, M., Nikolova, Y., Zagranjarska, I., Stoyanova, A., Nikolova, N., Mukova, L., Grozdanov, P., Nikolova, R., Shivachev, B., Kuz'min, V.E., Ognichenko, L.N., Galabov, A.S. and Dobrikov, G.M. (2019). Anti-enteroviral activity of new MDL-860 analogues: Synthesis, *in vitro/in vivo* studies and QSAR analysis. *Bioorganic Chemistry*, 85, pp.487–497.
7. Stoyanova, A., et al. Effect of the consecutive alternative administration (CAA) course of anti-enteroviral combination in coxsackievirus B infections in mice. *Europic/18th International Picornavirus Meeting*. 2014. Blankenberge, Belgium.
8. Stoyanova, A., V. Nikolova, and A.S. Galabov. Effect of a triple anti-enteroviral combination applied in consecutive alternative administration (CAA) course in coxsackievirus B1 neuroinfection in mice. *27th International Conference on Antiviral Research*. 2014. Raleigh, North Carolina, USA.

ХЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИЗИРАНА ЦИКЛИЗАЦИЯ НА АМИДИ НА 2-ФЕНИЛЭТИЛАМИН С ФЛУРБИПРОФЕН ЗА СИНТЕЗ НА НОВИ ПРОИЗВОДНИ НА 1,2,3,4-ТЕТРАХИДРОИЗОХИНОЛИНА

Дияна Димитрова, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов

Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, Катедра
Органична химия, ул. Цар Асен 24, Пловдив, 4000,
e-mail:manolov@uni-plovdiv.net

Флурбипрофенът е широко разпространено нестероидно противовъзпалително средство, което притежава аналгетичен и антипиретичен ефект. От друга страна изохинолиновите и β -карболиновите алкалоиди са известни с широкия спектър от биологични активности. Интерес представлява получаването на нови съединения съдържащи както изохинолонов/ β -карболинов, така и флурбипрофенов остатък в структурата на молекулата си. В тази връзка успешно са синтезирани междинни амиди **2** в реакция между флурбипрофен и различно заместени амини **1** в присъствието на DCC като дехидратиращ агент (Схема 1).

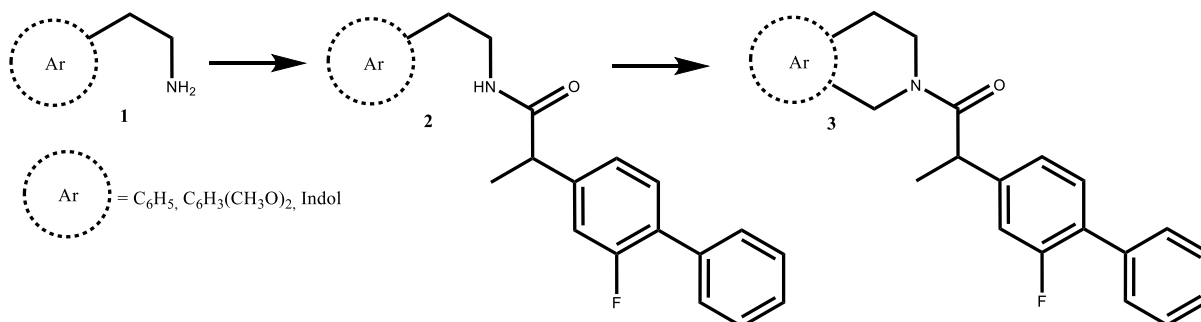


Схема 1. Синтез на флурбипрофенови производни

Получените флурбипрофенови амиди **2** успешно участват в реакция на хетерогенно-катализирано вътрешномолекулно α -амидоалкилиране. Като хетерогенен киселинен катализатор бе използвана системата TfOH/SiO₂. След протичане на реакцията, същата се регенерира и може да се използва отново. Получените нови изохинолинови и β -карболинови производни **3** са интересни с оглед изследване на биологичната им активност, както и търсене на корелация между структура и активност. Получените вещества са нови съединения (Reaxus) и са охарактеризирани спектрално.

Благодарности: Проект КП-06-M29/1

ПРИЛОЖЕНИЕ НА ХЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИЗИРАНА ЦИКЛИЗАЦИЯ ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА ПРОФЕНОВИ ПРОИЗВОДНИ НА АЛКАЛОИДА CHERYLLINE

Теодора Тодорова, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов

Пловдивски университет „Паусий Хилендарски“, Химически факултет,
Катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24, Пловдив, 4000,
e-mail:manolov@uni-plovdiv.net

Алкалоидът *cherylline* е природен, оптически активен 4-арил-1,2,3,4-тетрахидроизохинолинов алкалоид, изолиран от корените на *Crinum Powellii*, *Crinum latifolium*, *Crinum bulbispermum* и *Crinum macowanii*, семейство *Amaryllidaceae*. В природата се среща под (-) или (S) енантиомер. Представител е на много редки природни 4-арил-1,2,3,4-тетрахидроизохинолинови алкалоиди. Поради уникалността на структурата и лечебните им свойства са разработени редица начини за техния синтез. От друга страна производните на 2-арилпропионовата киселина - профените са важен клас нестероидни противовъзпалителни средства. В тази връзка интерес представлява получаването на производни на *cherylline* съдържащи профенов остатък в структурата си.

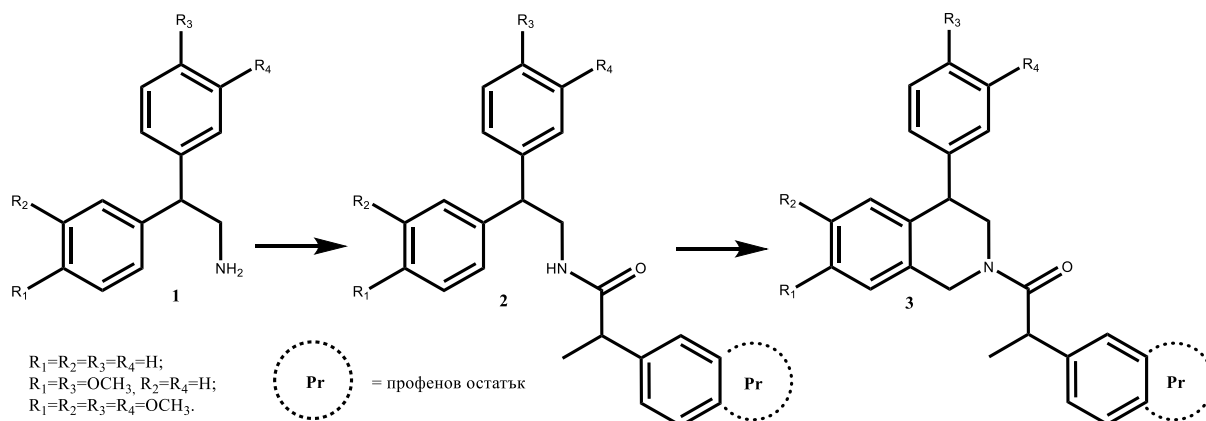


Схема 1. Синтез на профенови производни на *cherylline*

Успешно са синтезирани изходни амиди на ибупрофен и кетопрофен с 2,2-дифенилетил амин и негови аналози. Получените профен амиди **2** циклизират в условия на реакция на вътрешномолекулно α -амидоалкилиране в присъствие на PPA/SiO₂ като хетерогенен киселинен катализатор. При получените циклични продукти **3** се наблюдава получаването на диастереоизомерни двойки. Намерени са оптималните условия за разделяне на диастереоизомерите. Получените нови производни на *cherylline* **3** са интересни с оглед изследване на биологичната им активност, както и търсене на корелация между структура и активност. Получените вещества са нови съединения (Reaxys) и са охарактеризирани спектрално.

Благодарности: Проект КП-06-M29/1

НОВ МЕДЕН КОМПЛЕКС НА МОДИФИЦИРАН С 1,8-НАФТАЛИМИД ПАМАМ ДЕНДРИМЕР И НЕГОВАТА АНТИБАКТЕРИАЛНА И АНТИТУМОРНА АКТИВНОСТ

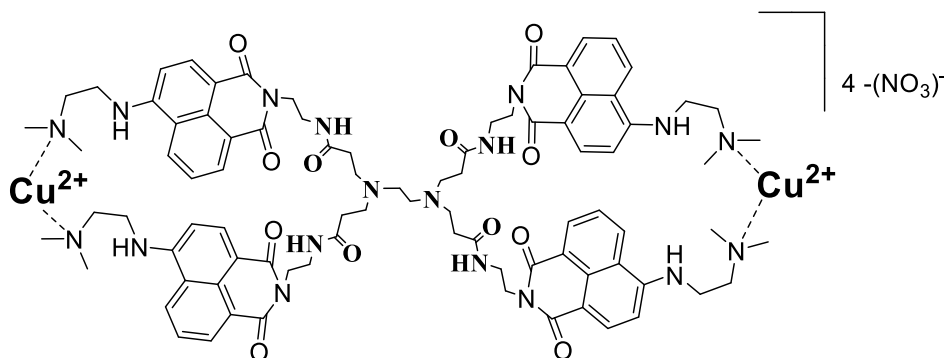
Христо Манов¹, Десислава Станева², Станимир Стоянов¹, Иво Грабчев³

¹ СУ“Св.Кл.Охридски“, Факултет по химия и фармация, София, бул.,Дж. Баучер“ 1,
x.g.manov@gmail.com

² Химикотехнологичен и металургичен университет, 1756 София

³ СУ“Св. Кл.Охридски“, Факултет медицина, София, ул. „Козяк“ 1

Синтезиран, изолиран и идентифициран е нов флуоресцентен меден комплекс на модифициран с 1,8-нафталиמיד ПАМАМ дендример. Изследвано е образуването на комплекса с флуоресцентна спектроскопия и е установено, че два медни йона образуват комплекс с дендримерния лиганд. Това беше потвърдено и чрез използване на ЕПР спектроскопия на медния комплекс в твърдо състояние. Изследвана е микробиологичната активност на медния комплекс спрямо грам негативна бактерия *Pseudomonas aeruginosa* на светло и тъмно и е установено, че активността му се повишава при облъчване с дневна светлина. Активността на медния комплекс се запазва и след отлагането му върху памучен плат. Също така е изследвана и антитуморната активност на медния комплекс и дендримерния лиганд спрямо клетки от рак на гърдата MDA-MB-231 клетки.



Фигура 1- Предложена структура на комплекс от дендримера с Cu (II) йони

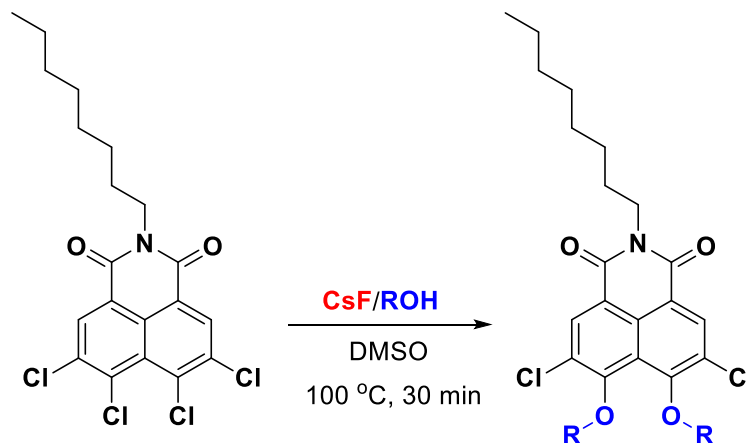
Благодарност: Авторите благодарят на Фонд научни изследвания, за финансовата подкрепа; Проект N КП-06-КОСТ/4

СИНТЕЗ НА ПЕРИ-ЗАМЕСТЕНИ ДИАЛКОКСИ 1,8-НАФТАЛИМИДНИ ФЛУОРОФОРИ

Моника Мутовска¹, Юлиан Загранярски¹

¹ Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“, катедра Органична химия и фармакогнозия, София, бул. Дж. Баучер 1, 1164, ohnmgm@chem.uni-sofia.bg

1,8-Нафталиמידите (1,8-НИ) се отличават с голяма фото-, термо- и химическа стабилност и с добър екстинкционен коефициент, което ги нарежда сред най-изследваните багрила и пигменти в багрилната и приложната химия. Заместените с електродонорни заместители 1,8-НИ са типични push-pull системи с относително голям диполен момент. Въвеждането на две алкокси групи в пери-позициите на 1,8-НИ, които макар и слаби електродонори, ще доведе до усилен диполен момент, дължащо се на пълното им спрежение. От друга страна по-слабо елктродонорните свойства на алкокси групите ще запази флуоресценцията в синята област, което е особено важно за приложението им като OLED.



С цел търсене на концепционално нов тип хромофори и флуорофори решихме да изследваме възможността за взаимодействие на 4,5-дихалогензаместените 1,8-НИ със слаби нуклеофили, като флуоридни йони, вода и алкохоли. Като моделен халогензаместен 1,8-НИ избрахме N-октил-3,4,5,6-тетрахлоро-1,8-нафталиמיד. Разработен е нов бърз и удобен метод за синтез на 4,5-диалкокси-1,8-нафталиמיד, като са синтезирани и охарактеризирани 11 съединения, от които 9 нови.

ПИРИДИН СЪДЪРЖАЩИ СКВАРАМИДИ – СИНТЕЗ, КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И ЦИТОТОКСИЧНА АКТИВНОСТ

Нина Русева¹, Емилия Д. Чернева¹, Адриана Г. Бакалова¹

¹ *Медицински Университет-София, Фармацевтичен факултет, катедра „Химия“, София - 1000, e-mail nina.dimitrova0325@abv.bg*

Квадратната киселина и нейните аналози представляват интерес за медицинската химия, поради уникалните си физикохимични и фармакокинетични свойства. Молекулната структура (напрегнат пръстен с повишена електрофилност и наличие на две карбонилни групи), позволява образуването на четири водородни връзки. Тези факти наред с разнообразните и многобройни области на приложение на представителите на този клас съединения – като лиганди в координационната химия, реагенти в органичния синтез, флуоресцентни багрила, нелинейно-оптични хромофори и биологично-активни съединения, обуславят трайния интерес и към производните на квадратната киселина.

Синтезирани са два нови монокварамида, съдържащи пиридинов фрагмент. Съединенията са получени по метод, описан от *Tietze*, а именно кондензация на диетиловия естер на квадратната киселина със съответните аминокварамиди. Молекулната структура на новосинтезираните монокварамиди е изследвана чрез елементарен анализ, ИЧ, ЯМР спектрални методи.

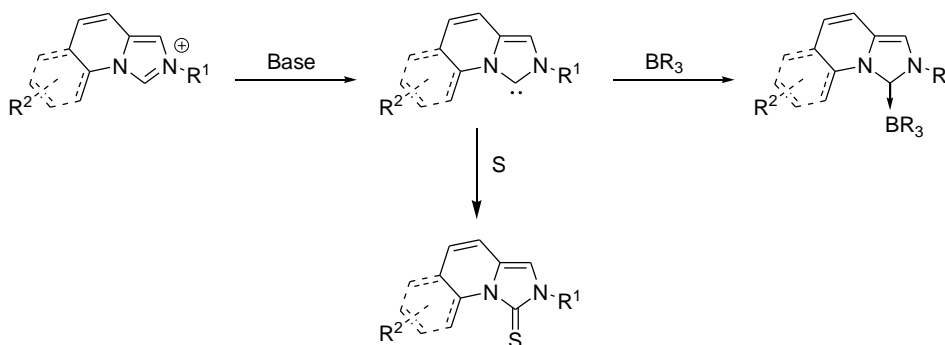
Вследствие на добрата кристализационна способност беше определена молекулната и кристална структура на един от синтезираните монокварамиди, а именно 3-етокси-4-(2-(пиридин-3-ил)етиламино)циклобут-3-ен-1,2-дион. Съединението кристализира в моноклинна пространствена система, пространствена група $P2_1/n$. Молекулната структура на синтезираните съединения е изследвана и чрез квантово-химични изчисления. DFT данните са в добро съответствие с вибрационните честоти на изследваните съединения.

ИЗСЛЕДВАНЕ НА ВЪЗМОЖНОСТИТЕ ЗА УЛАВЯНЕ НА НОВИ N-ХЕТЕРОЦИКЛЕНИ КАРБЕНИ С БОР И СЯРА

Любен Бориславов¹, Румен Ляпчев¹, Ивелина Маджарова¹, Деница Еленкова¹,
Невена Петкова¹, Петър Петров¹

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
бул. „Джеймс Баучер“ 1, 1164 София, България, lubenkr@abv.bg

N-хетероциклените карбени (NHC) са клас стабилни, синглетни карбени, намиращи приложение като лиганди в преходнометалния катализ. Те са могат да реагират с различни халкогенни елементи, образувайки адукти от типа $NHC=E$ ($E = O, S, Se$). Освен това N-хетероциклените карбени могат да взаимодействат с борани, при което се образуват комплекси от типа $NHC-BR_3$, наречени NHC-борани. Поради електронните свойства на NHC, техните борни комплекси и серни адукти представляват интерес в областта на органичните флуорофори.



Имидазохинолинилидените и имидазопиридилидените са N-хетероцикленни карбени, чиито електронни и стерични свойства могат бъдат настройвани чрез промяна на заместителите R¹ и R².

Бяха проведени експерименти с цел, получаване на серия от имидазохинолинилиденови и имидазопиридилиденови тиони и борани. Успешно получените съединения бяха изследвани чрез абсорбционна и флуоресцентна спектроскопия.

Благодарности:

Авторите благодарят на проекти 80-10-149/26.03.2021 г. и 80-10-86/15.04.2020 г към НИС на СУ. РЛ изказва благодарност за получената финансова подкрепа по програмата на МОН "Млади учени и постдокторанти" (изходящо писмо 95/20.12.2019).