

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

**18-20 май 2022 г. СОФИЯ**



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

**XX Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2022**  
**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/scc2022/>**

**XX 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**

**Конференцията се организира с подкрепата на проект "EXTREME", финансиран от Министерството на образованието и науката по Национална програма „Европейски научни мрежи“**

#### **НАУЧЕН СЪВЕТ**

чл.кор. проф. Тони Спасов, СУ  
акад. проф. Христо Цветанов, БАН  
акад. проф. Константин Хаджииванов, БАН  
акад. 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  
докторант Кристина Симеонова, СУ  
докторант Николай Даскалов, СУ  
студент Стоян Граматиков, СУ  
студент Мария Георгиева, СУ

## XX Национална конференция по химия за студенти и докторанти Програма

### 18 май 2022, 130 аудитория на ФХФ, СУ

- 14:00 14:20 **Регистрация**, пред 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ
- 14:20 15:20 **Откриване**, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ  
**Лекция на проф. д-р Васил Атанасов**, Факултет по химия и фармация на СУ, София  
*„От отровата на пепелянката до жертвата на местопрестъплението“*
- 130 аудитория на ФХФ, СУ
- Секция „Изчислителна химия“**
- 15:20 15:40 Мария Г. Георгиева, Искра З. Колева, Християн А. Александров  
*„Квантовохимично моделиране на взаимодействието на азот с наночастици на преходни метали“*
- 15:40 16:00 Чара Бориславова, Симона Джумайска, Анела Иванова  
*„Сини флуоресцентни багрила за органични светодиоди – как влияят фрагментите на оптичните им свойства?“*
- 16:00 16:20 Любен Бориславов, Юлия Романова, Аля Таджер  
*„Търсене на хромофори за синглетно разцепване чрез машинно обучение“*
- 16:20 16:40 Янислав Данчовски, Христо Рашеев, Радостина Стоянова, Аля Таджер  
*„Координационни полимери като електродни материали за Li-йонни батерии“*
- 16:40 17:00 Даниел Динев, Христо Рашеев, Радостина Стоянова, Аля Таджер  
*„Как да направим органичен електрод по-примамлив за магнезий“*
- 17:00 17:20 Христо Рашеев, Агниешка Серемак, Радостина Стоянова, Аля Таджер  
*„Моделиране на нов 3D-материал за презареждаеми батерии“*
- 17:20 17:40 Кафе-пауза**
- 17:40 18:00 Гергана Костадинова, Румен Ляпчев, Аля Таджер, Marc de Wergifosse, Юлия Романова  
*„Дизайн на възбудени състояния при димери на азотсъдържащи хетероциклени карбени“*
- 18:00 18:20 Стоян Илиев, Соня Цибранска, Анела Иванова, Славка Чолакова, Николай Денков  
*„Идентифициране и анализ на подредени структури в хексадека-съдържащи системи, получени с молекулна динамика“*
- Секция „Физикохимия“**
- 18:20 18:40 Мария Пимпилова, Ванина Иванова – Колчева, Мария Стоянова, Нина Димчева  
*„Сравнително изследване на електрокаталитична активност на Co-g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> модифициран електрод – катализатор за електрохимична редукция на пероксидни съединения във водна среда“*
- 18:40 19:00 Трифон Т. Попов, Венелин Д. Денчев, Светлана Х. Христова, Александър М. Живков  
*„Повърхностен електричен потенциал и енергия на асоциация на S-протеина на мутантите на коронавируса с ACE2 рецептора на епителните клетки“*
- 19:00 19:20 Филип Маринов, Невена Царевска, Константин Балашев  
*„Влияние на йонизиращата радиация върху активността на ензима инвертаза“*
- 19:20 19:40 Димитър Шандурков, Нина Данчова, Веселин Петров, Стоян Гуцов  
*„Нови материали с многоцветна емисия: физикохимични и оптични свойства“*

**19 май 2022, заседателна зала на ФХФ, СУ**

**Секция „Аналитична химия“**

- 09:00 09:20 Николай Петков, Ивайла Панчева  
*„Комплексообразване на антибиотиците монензин и салиномицин с йони на церий“*
- 09:20 09:40 Росица Костандиева, Силвия Стойкова, Иво Иванов, Васил Атанасов  
*„Жлъчката като алтернативна проба при postmortem скринингов анализ“*
- 09:40 10:00 Ива Беловеждова, Валентина Любомирова  
*„Изследване на възможностите за пробоподготовка при LA-ICP-MS анализ на проби от отпадъци“*
- 10:00 10:20 Димитър Стоицов, Веселин Кметов  
*„Разработване на PVG-MSIS-MP-AES метод за определяне на живак“*
- 10:20 10:40 Кафе-пауза**
- 10:40 11:00 Георги Василев, Вероника Михайлова  
*„Количествено определяне на неорганични аниони в повърхностни и питейни води с помощта на йонна хроматография“*
- 11:00 11:20 Ралица Пуртева, Елисавета Младенова, Иван Бакърджийски  
*„Миграция на елементи в системите бентонит-моделен разтвор и бентонит-вино“*

**Секция „Полимери“**

- 11:20 11:40 Николай Петров, Констанс Русева, Елена Василева  
*„Влияние на рН и солевата концентрация върху способността на полицивитерйонни двуслойни хидрогелове да променят контролирано формата си“*
- 11:40 12:00 Кюдратло Сахибудинов, Християна Сараджова, Годор Иванов, Мурад Реджеб  
*„Разработване на смоли за стереолитографско биопринтиране на орган-в-чип“*

**12:00 12:40 Обедна почивка**

**Секция „Химични технологии и инженерна химия“**

- 12:40 13:00 Мартин Пантов, Десислава Глушкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков  
*„Ротаторни фази в смесени алканови капки“*
- 13:00 13:20 Александра Тодорова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков  
*„Реологични характеристики на обемни ротаторни фази на линейни алкани“*
- 13:20 13:40 Анита Бисерова, Десислава Глушкова, Кръстина Цветкова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков  
*„Роля на адсорбционния слой на ПАВ за стабилността на несферични алканови капки“*
- 13:40 14:00 Десислава Глушкова, Анита Бисерова, Диана Чолакова, Славка Чолакова  
*„Фазово поведение на натриев додецилбензенсулфонат в смеси от вода и органичен разтворител“*

XX Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2022

- 14:00 14:20 Татяна Славова, Красимир Данов, Румяна Станимирова, Вероника Яврукова  
*„Разтворимост на йонни повърхностно-активни вещества под температурата им на Крафт в смесени мицеларни разтвори: фазови диаграми за метил естер сулфонати и нейонни косърфактанти“*
- 14:20 14:40 Кафе-пауза**
- 14:40 15:00 Вяра Йорданова, Златина Митринова, Славка Чолакова  
*„Реология на разтвори на ПАВ: Роля на противойона и главата на сърфактанта“*
- 15:00 15:20 Памела К. Петрова, Славка С. Чолакова, Светослав Е. Аначков  
*„Реология на анионни/цвитерйонни смеси: ефект на ко-йоните“*
- 15:20 15:40 Петър Борисов, Фатмегюл Мустан-Борисова, Златина Митринова, Славка Чолакова  
*„Реологично поведение на разтворите на есцин“*
- 15:40 16:00 Боян Пейчев, Иглика Димитрова, Радомир Славчов  
*„Диполен потенциал на прости повърхности“*
- 16:00 16:20 Кафе-пауза**
- 16:20 16:40 Борис Константинов, Изида Златарева, Силвия Симеонова, Михаил Георгиев  
*„Адсорбция на катионни повърхностно активни вещества върху твърда повърхност“*
- 16:40 17:00 Ралица Узунова, Румяна Станимирова, Красимир Данов, Теодор Гърков  
*„Кинетика на адсорбция на летливи амфифилни молекули на граница вода/пари и нискомолекулно ПАВ/пари“*
- 17:00 17:20 Никола Генчев, Васил Георгиев, Златина Митринова, Славка Чолакова  
*„Пени стабилизирани с поливинил алкохоли“*
- 17:20 17:40 Васил Георгиев, Никола Генчев, Златина Митринова, Николай Денков, Славка Чолакова  
*„Ефект на силиконов антипенител върху пени, образувани от разтвори на поливинил алкохоли“*
- 17:40 18:00 Кафе-пауза**
- 18:00 18:20 Кръстина Стефанова, Васил Георгиев, Златина Митринова, Славка Чолакова  
*„Пенливост на разтвори, съдържащи глицерол“*
- 18:20 18:40 Росена Крушовалиева, Христо Цачев  
*„Приготвяне на липозоми предназначени за офталмологично лекарствено доставяне“*
- 18:40 19:00 Владимир Петков, Захари Винаров, Славка Чолакова  
*„Приготвяне на аморфни твърди дисперсии на глибенкламид и разтваряне в биоподобна среда“*
- 19:00 19:20 Делян Кръстев, Захари Винаров, Васил Атанасов, Славка Чолакова, Николай Денков  
*„In vitro модел за определяне разпределението на активни лекарствени вещества между моделна плазма и липидна емулсия“*

**20 май 2022, 130 аудитория на ФХФ, СУ**

**Секция „Органична химия“**

- 09:00 09:20 Любен Бориславов, Румен Ляпчев, Ивелина Маджарова, Деница Еленкова, Мартин Цветков  
*„Получаване на тиони, производни на имидазохинолин- и имидазопиридинилидени“*
- 09:20 09:40 Михаил Коларски, Румен Ляпчев, Йоана Захариева  
*„Синтез и изследване на нови 1,10-фенантролинови производни“*
- 09:40 10:00 Михаела Стоянова, Румяна Бакалска, Мина Тодорова, Цонко Колев  
*„Синтез, структурно и спектрално изследване на ново хемицианиново багрило“*
- 10:00 10:20 Елица Петкова, Мина Тодорова, Румяна Бакалска, Цонко Колев  
*„Синтез, спектрално и структурно изследване на ново мероцианиново багрило“*

**10:20 10:40 Кафе-пауза**

- 10:40 11:00 Параскева Терзийска, Пламен Ангелов  
*„Синтез на нови структурни аналози на Фулигокандин А“*
- 11:00 11:20 Ивелина Койчева, Йордан Стремски, Стела Статкова-Абегхе, Десислава Киркова, Пламен Ангелов, Илиян Иванов  
*„Нов метод за синтез на близки структурни аналози на фитоалексина Camalexin“*
- 11:20 11:40 Ивелина Маджарова, Румен Ляпчев, Ана Колева, Невена Петкова-Янкова, Росица Николова  
*„Функционализиране на кумаринови системи чрез реакции на Сузуки и Соногашира“*
- 11:40 12:00 Юлиян Романов, Ана Колева, Невена Петкова-Янкова, Росица Николова  
*„Влияние на заместителите в кумариновия пръстен в реакции на димеризация на етиловия естер на кумарин-3-карбоксилната киселина“*

**12:00 12:40 Обедна почивка**

- 12:40 13:00 Николай Лазаров, Савина Стоянова, Милен Г. Богданов  
*„Нова дефиниция и обогатяване на набор от константи за предвиждане на плътности на йонни течности чрез метода на остатъчния обем“*
- 13:00 13:20 Савина Стоянова, Милен Г. Богданов  
*„Хетероциклени гама-бутиробетаини като потенциални метаболитни модулатори“*
- 13:20 13:40 Стефан Караджов, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов  
*„Синтез на нови биофункционални амфетаминови производни и изследване на тяхната in vitro биологична активност“*

**Секция „Фармацевтична химия“**

- 13:40 14:00 Надежда Батаклиева, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов  
*„Синтез на нови биофункционални кетопрофенови производни с различни N-съдържащи хетероцикли и определяне на тяхната антиоксидантна активност“*
- 14:00 14:20 Дияна Димитрова, Димитър Божилов, Илиян Иванов, Станимир Манолов  
*„Изследване in vitro биологичната активност на нови биофункционални хибриди на флурбипрофен“*
- 14:20 14:40 Ивет Иванова, Димитър Божилов, Илиян Иванов, Станимир Манолов  
*„Изследване in vitro биологичната активност на нови биофункционални хибриди на напроксен“*

**14:40 15:00 Кафе-пауза**

### Секция „Фитохимия и фармакогнозия“

- 15:00 15:20 Мила Димитрова, Анели Неделчева  
*„Лечебни растения за педиатрична употреба“*
- 15:20 15:40 Анджелика Начева, Димитър Божилов, Станимир Манолов, Илиян Иванов  
*„Фракциониране на полифенолния състав на огниче с различни по полярност разтворители и изследване на тяхната биологична активност“*
- 15:40 16:00 Габриела Иванова, Димитър Божилов, Станимир Манолов, Солея Даньо, Илиян Иванов  
*„Изолиране на полифеноли от котешка стъпка (*Clinopodium vulgare*) с различни разтворители и изследване *in vitro* биологичната им активност“*
- 16:00 16:20 Сезан Феим, Димитър Божилов, Станимир Манолов, Илиян Иванов  
*„Изолиране, анализ на полифеноли от безсмъртниче (*Helichrysum italicum L.*) и изследване на тяхната потенциална биологична активност“*
- 16:20 16:40 Иван Лаловски, Маргарита Кръстева, Иван Свиняров, Анели Неделчева  
*„Изпитване за чистота и идентичност на продукти, съдържащи полски хвоц – предварително проучване“*
- 16:40 17:00 Асен Стоянов, Анели Неделчева  
*„Анализ на примеси и подмеси в проби от шафран“*

### 17:00 17:20 Кафе-пауза

### Секция „Неорганична химия“

- 17:20 17:40 Красимир Колев, Борис Яначков, Людмил Лютов  
*„Влияние на отделянето на водород в процеса на електрохимично получаване на чисто желязо от хлориден електролит“*
- 17:40 18:00 Яна Димитрова, Румен Ляпчев, Михаил Коларски, Мартин Цветков, Йоана Захариева, Деница Еленкова  
*„Комплекси на лантаноидни йони с 2-хлоро-1,10-фенантролин“*
- 18:00 18:20 Яна Димитрова, Мартин Цветков, Деница Еленкова  
*„Синтез на лантаноидни метал-органични рамки по солвотермален метод“*
- 18:20 18:40 Кристиян Веселинов, Деляна Маринова, Мария Калъпсъзова, Екатерина Жечева, Радостина Стоянова  
*„Структурна трансформация, индуцирана след интеркалация на литий, на  $Na_2Mn_2(SO_4)_3$  с алуаудитен тип структура в орторомбичен  $Li_2Mn_2(SO_4)_3$ “*
- 18:40 19:00 Елжана Енчева, Мартин Цветков, Мария Миланова  
*„Механохимичен синтез на  $LaFeO_3$  и неговото приложение за ефективно премахване на антибиотици във води чрез сулфатна радикалова фото-Фентън реакция“*

### Секция „Катализ“

- 19:00 19:20 Мануела Ойкова, Маргарита Попова, Христина Лазарова, Агнес Сегеди, Павлета Шестакова, Нели Косева  
*„Хидродеметоксилиране/деалкилиране на бифункционален наноразмерен зеолит Бета“*

**19:20 19:40 Закриване**, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

**19:40 Коктейл**, пред 210 аудитория



## **СЕКЦИЯ ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ**

**Мария Георгиева ФХФ - СУ**

**Чара Бориславова ФХФ - СУ**

**Любен Бориславов ФХФ - СУ**

**Янислав Данчовски ФХФ - СУ**

**Даниел Динев ФХФ - СУ**

**Христо Рашеев ФХФ - СУ**

**Гергана Костадинова ФХФ - СУ**

**Стоян Илиев ФХФ - СУ**

## **КВАНТОВОХИМИЧНО МОДЕЛИРАНЕ НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕТО НА АЗОТ С НАНОЧАСТИЦИ НА ПРЕХОДНИ МЕТАЛИ**

Мария Г. Георгиева, Искра З. Колева, Християн А. Александров

*Факултет по химия и фармация, Софийски Университет „Св. Климент Охридски“,  
бул. Джеймс Баучър, 1164 София, e-mail: mariyageorgieva876@gmail.com*

Преходните метали са често използвани в хетерогенния катализ поради високата им каталитична активност и термична стабилност. При реакции протичащи на техните повърхности включващи органични реагенти,  $\text{CO}_x$ ,  $\text{NO}_x$ ,  $\text{NH}_3$  и др., често се натрупва въглерод и/или азот, което води до модифициране на свойствата на каталитичната система.<sup>1,2</sup> В много случаи металните карбиди и нитриди също се използват като катализатори и са обект на засилен интерес, поради по-ниската си цена в сравнение с благородните метали. Оттук е важно детайлното изучаване на взаимодействието на атомите на тези два елемента с металните системи, за което могат да допринесат теоретични изследвания базирани на квантовохимични изчисления. Така например в наше преходно изследване показахме, че подповърхностният С може да бъде стабилен (термодинамично и кинетично) не само в металите от група 10 (Ni, Pd, Pt), но също и в тези от група 11 (Cu, Ag, Au) на периодичната система.<sup>3</sup> В настоящото изследване моделирахме взаимодействието на N атом с наночастица състояща се от 79 атома на преходни метали (Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au). Установени са енергетично най-изгодните позиции за N атом адсорбиран на повърхността или намиращ в подповърхностния слой на металната наночастица. Периодичните квантовохимични изчисления са проведени с програмен пакет VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), базиран на теорията на плътностния функционал, като е използван обменно-корелационен функционал PBE и базис от плоски вълни с енергетичен праг 415 eV.

*Работата е подкрепена от Европейския фонд за регионално развитие в рамките на Оперативна програма "Наука и образование за интелигентен растеж 2014 - 2020" в рамките на проекта ЦВП "Национален център по мехатроника и чисти технологии" BG05M2OP001-1.001-0008.*

Цитати:

1. S. M. Davis, G. A. Somorjai, *The Chemical Physics of Solid Surfaces and Heterogeneous Catalysis*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1983.
2. J. Borsodi, A. Woosch, Z. Révay, M. Hävecker, A. Knop-Gericke, S. D. Jackson and R. Schlögl, *Science*, 2008, 320, 86.
3. O. Piqué, I. Z. Koleva, F. Viñes, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, F. Illas, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, 58, 1744

## **СИНИ ФЛУОРЕСЦЕНТНИ БАГРИЛА ЗА ОРГАНИЧНИ СВЕТОДИОДИ – КАК ВЛИЯТ ФРАГМЕНТИТЕ НА ОПТИЧНИТЕ ИМ СВОЙСТВА?**

Чара Бориславова, Симона Джумайска, Анела Иванова

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,  
Катедра Физикохимия, бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164 София., charakrb@gmail.com*

В днешно време всички сме заобиколени от различни електронни устройства, които съдържат органични светодиоди. Ефективността на светене на екраните им обаче може да се подобри, като се намери по-ярко флуоресциращо синьо багрило. Един от начините да се постигне това е като се търсят багрила проявяващи термично активирана забавена флуоресценция [1]. Това изисква да се получат молекули с високи по енергия триплетни възбудени състояния.

Постигане на излъчване на светлина в синята област в комбинация с високоенергетични възбудени нива е възможно чрез конструиране на органични съединения, комбиниращи електрон-донор, мост и електрон-акцептор [2]. Търсят се такива фрагменти, които могат да съществуват и като самостоятелни молекули. Връзката между техните оптични характеристики и тези на комбинирания емитер обаче не е изяснена. Целта на настоящото проучване е да се открие корелация между оптичните свойства на фрагментите и тези на съставната молекула. За да се постигне това, абсорбционните и емисионните характеристики на серия от донори, мостове и акцептори са изчислени с DFT метода и получените данни са съпоставени с тези от изчисленията за комбинирани багрила. Върху данните за абсорбционните и емисионните преходи е приложена многомерна линейна регресия и са определени водещите описатели.

От резултатите си личи, че характеристиките на донора оказват най-голямо влияние върху тези на съставните молекули при абсорбция на светлина. Избраният линеен модел обаче не е оптимален. При емисията значението на моста и на акцептора се засилва спрямо абсорбцията, но отново най-голямо влияние има донорният фрагмент.

Цитати:

[1] Y. Zou, S.L. Gong, G.H. Xie, C.L. Yang, *Adv. Opt. Mater.*, **2018**, 6, 1800568

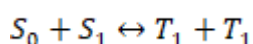
[2] G. Valchanov, A. Ivanova, A. Tadjer, D. Chercka, M. Baumgarten, *J. Phys. Chem. A* **2016**, 120, 6944.

## **ТЪРСЕНЕ НА ХРОМОФОРИ ЗА СИНГЛЕТНО РАЗЦЕПВАНЕ ЧРЕЗ МАШИННО ОБУЧЕНИЕ**

Любен Бориславов, Юлия Романова, Аля Таджер

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

Синглетното разцепване (SF) е процес, при който молекула, възбудена до първото си синглетно състояние, може да взаимодейства с друга молекула, намираща се в основно състояние, при което се получават два триплетни екситона:



Хромофорите, които могат да претърпят синглетно разцепване, намират приложение като материали за органични фотоволтаични клетки, тъй като при облъчване с един фотон слънчева светлина са в състояние да произведат четири токови носители, вместо конвенционалните два, което позволява удвояване на ефективността на слънчевата батерия.

Дирадикаловият характер (DRC) се дефинирана като удвоеното тегло на двойновъзбудената 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 молекулите. Известно е, че хромофорите с дирадикалов характер между 0.05 и 0.50 са склонни да участват в синглетно разцепване и че това са относително рядко срещани молекули.

Машинното обучение и статистиката се прилагат успешно за решаване на голям брой регресионни и класификационни проблеми. Целта на настоящото изследване е построяване на модел за “пресяване” на потенциални SF-хромофори на база техни структурни и квантово-химични характеристики. За постигане на тази цел беше създадена база от данни съдържаща квантово-химични и хемометрични дескриптори на голям брой органични съединения. Тъй като сравнително малко молекули могат да претърпят синглетно разцепване, в базата от данни преобладава класът на молекулите, които не могат да участват в този процес. Беше разработена ефективна, използваща машинно обучение, прескринингова процедура за намиране на потенциални SF-хромофори в базата от данни, като бяха преодолените проблемите свързани с небалансираността на молекуления набор по отношение на съставляващите го класове.

## **КООРДИНАЦИОННИ ПОЛИМЕРИ КАТО ЕЛЕКТРОДНИ МАТЕРИАЛИ ЗА Li-ЙОННИ БАТЕРИИ**

Янислав Данчовски<sup>1,2</sup>, Христо Рашеев<sup>1,2</sup>, Радостина Стоянова<sup>2</sup>, Аля Таджер<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“ №1, София 1164, [fhyd@chem.uni-sofia.bg](mailto:fhyd@chem.uni-sofia.bg)

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

Традиционно електродите на търговските Li-йонни батерии са от неорганичен произход и съдържат предимно оксиди на преходни метали. Въпреки това, приложението на органични материали като електроди провокира изучаването им, поради многобройните им преимущества и възможностите за увеличаване на производителността им. Сред тези предимства са модифицируемата им структура, ниското им тегло и достъпността за компютърно моделиране, позволяващо предсказване на целевите им свойства. Съчетанието между преходен метал и лиганд би увеличило допълнително редокс центрите в материала, което би довело до по-висок електрохимичен потенциал и капацитет за литиева интеркалация.

Целта на настоящото изследване е да моделира и предскаже електрохимичните свойства на координационни полимери, съставен от Ni-йони в две окислителни състояния и хинонови лиганди с различни заместители. Редица структурни и енергетични параметри са цялостно изследвани в периодични гранични условия и са открити главните тенденции на литиева интеркалация. Електродният потенциал е пресметнат на всяка стъпка от последователната редукция с литий. Получени са обещаващи резултати за електродния потенциал и капацитета на материалите. Те могат да бъдат успешно приложени като електродни материали в Li-йонни батерии и биха могли да предложат добра алтернатива на традиционните такива. Структурите показват добра стабилност и поради тяхната геометрия биха могли да бъдат нанесени слоесто върху проводяща подложка, предлагайки множество редокс-центрове на малка площ. Комбинацията на органични и неорганични елементи се оказва успешна стратегия за моделиране на сложни по строеж материали за съхранение и превръщане на енергия.

*Изследването е подкрепено от договор Д-01-214/2018 и проект CARiM-VIHREN, КП06-ДВ-6/16.12.2019 към Фонд научни изследвания.*

## **КАК ДА НАПРАВИМ ОРГАНИЧЕН ЕЛЕКТРОД ПО-ПРИМАМЛИВ ЗА МАГНЕЗИЙ**

Даниел Динев<sup>1,2</sup>, Христо Рашеев<sup>1,2</sup>, Радостина Стоянова<sup>2</sup>, Аля Таджер<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,  
бул. „Джеймс Баучер“ №1, София 1164, [danieldinev00@gmail.com](mailto:danieldinev00@gmail.com)

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

В последно време множество научни екипи проявяват интерес към органични редокс-активни съединения, които биха могли да служат за катоден материал в метало-йонни батерии. Основните им предимства са тяхната ниска цена, екологичност и лесна химическа модификация чрез функционализация с групи, засилващи тяхната редокс-активност. Литият е доста скъп за получаване и оскъден на нашата планета, така че се търсят алтернативни токоносителни за зеленото бъдеще на метало-йонните батерии. Магнезият не е токсичен, широко разпространен и щадящ околната среда, неговият йон е достатъчно малък и лек, носи два пъти по-голям заряд от  $\text{Li}^+$  и  $\text{Na}^+$ , което прави Mg-йонните батерии най-добрата алтернатива на традиционните литиево-йонни батерии. Основните препятствия пред Mg-йонните батерии са разлагането на електролита върху метален магнезий при презареждане и недостигът на електродни материали, подходящи за обратима интеркалация на магнезий. Последният проблем може да бъде решен чрез използване на редокс-активни органични материали. За съжаление, те са непроводящи и обикновено са доста разтворими в електролита. За да преодолеем тези проблеми, от една страна органичните редокс-активни молекули (хинони) бяха включени, в комплекси с йон на преходен метал ( $\text{Ni(II)}$ ), а от друга страна, моделираният комплекс беше свързан ковалентно с графен, което осигури и проводимост на материала. Използвайки периодични DFT изчисления (PBE), бе определен количествено ефектът на топологията и степента на функционализация на хинона с електрон-акцепторни групи върху електрохимичния потенциал и теоретичния капацитет на материала спрямо магнезий.

*Изследването е финансирано по проект CARiM-VIHREN, КП06-ДВ-6/16.12.2019 към Фонд научни изследвания.*

## **МОДЕЛИРАНЕ НА НОВ 3D-МАТЕРИАЛ ЗА ПРЕЗАРЕЖДАЕМИ БАТЕРИИ**

Христо Рашеев<sup>1,2</sup>, Агниешка Серемак<sup>1,3</sup>, Радостина Стоянова<sup>2</sup>, Аля Таджер<sup>1,2</sup>

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

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

<sup>3</sup>*Faculty of Chemistry, Wroclaw University of Science and Technology, 50-373 Вроцлав, Полша*

Разнообразните приложения на презаредимите батерии в преносими устройства и електрически превозни средства обуславят нестихващия интерес към тях както на експериментатори, така и на теоретици. В допълнение, поради непостоянния характер на производството на енергия от възобновяеми енергийни източници, наред с мобилни са нужни и стационарни батерии със значително по-голям размер. В тази връзка, ефективността на съществуващите батерии трябва да се подобри. Първостепенна задача за усъвършенстването на батериите е разработването на нови електродни материали с по-голям капацитет и енергийна плътност. Ключово изискване към новите материали е да работят с токоносители на по-разпространени и по-евтини елементи като натрий и магнезий, като по този начин да минимизират негативното въздействие на производството на батерии върху околната среда. Един от основните инструменти за дизайн и предсказване на свойства на нови материали е квантовата химия. В настоящето изследване е моделирана нова тримерна метал-органична мрежа (MOF) съставена от Ni(II) и линкъри от функционализиран бензохинон. Чрез теорията на функционала на плътността са оценени окислително-редукционните свойства на материала спрямо литий, натрий и магнезий. Получени са профилите на електрохимичния потенциал за всеки метал и са обсъдени в светлината на структурните промени и преразпределението на заряда в моделните системи. Изчислените теоретични капацитети (1065, 710 и 533 mA.h.g<sup>-1</sup> съответно за Li, Na, и Mg) и енергийни плътности на материала са особено обещаващи и очертават възможността за приложението му в следващо поколение презареждаеми батерии.

*Изследването е финансирано по проект CARiM-VIHREN, КП06-ДВ-6/16.12.2019 към Фонд научни изследвания.*

## ДИЗАЙН НА ВЪЗБУДЕНИ СЪСТОЯНИЯ ПРИ ДИМЕРИ НА АЗОТСЪДЪРЖАЩИ ХЕТЕРОЦИКЛЕНИ КАРБЕНИ

Гергана Костадинова<sup>1</sup>, Румен Ляпчев<sup>1</sup>, Аля Таджер<sup>1</sup>, Marc de Wergifosse<sup>2</sup>,  
Юлия Романова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, София 1164, България,  
\*jromanova@chem.uni-sofia.bg

<sup>2</sup>Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Institut für Physikalische und Theoretische  
Chemie, Bonn, Germany

В последното десетилетие бяха открити редица органични материали, способни на „екзотични“ фотофизични процеси, чрез които се повишава производителността на соларните клетки и светодиодите. Такива фотофизични процеси са например синглетното разцепване, термично активираната забавена флуоресценция и триплет-триплетната анихилация. При всички тях основни критерии за приложимостта на материала на молекулно ниво е взаимното енергетично разположение на нисколежащи възбудени синглетни и триплетни състояния като  $S_1$ ,  $T_1$  и  $T_2$ . Ето защо, за напредъка в областта е от изключително значение по-задълбоченото разбиране на структурните фактори, които диктуват енергетиката и свойствата на възбудените състояния при органичните хромофори.

В настоящето изследване представяме семейство от новоразработени материали с атрактивни оптични свойства, базирани на азотсъдържащи хетероциклени карбенови димери [1]. Възбудените състояния на съединенията са оценени с помощта на наскоро създадения *spin-flip simplified* TD-DFT метод [2]. Изследваният набор от молекули ни позволява да изучим в детайли взаимовръзките между енергия на възбудените състояния и структура, като са проследени следните фактори: конформация, топология, ефект на заместителите и хиралност. Изведени са нови стратегии за дизайн на фотоактивни хромофори и са предложени органични материали с потенциално желани оптични характеристики.

### Цитати:

1. G. Kostadinova, R. Lyapchev, J. Stoycheva, L. Borislavov, A. Tadjer, M. de Wergifosse and J. Romanova, *ChemRxiv* 2022, Preprint, 10.26434/chemrxiv-2022-56571.
2. M. de Wergifosse, C. Bannwarth and S. Grimme, *J. Phys. Chem. A* 2019, vol. 123, 5815-5825.



## **ИДЕНТИФИЦИРАНЕ И АНАЛИЗ НА ПОДРЕДЕНИ СТРУКТУРИ В ХЕКСАДЕКАН-СЪДЪРЖАЩИ СИСТЕМИ, МОДЕЛИРАНИ 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*

Известно свойство на средновеижните алкани е, че при охлаждане могат да образуват преходни фази между изотропна течност и кристал, наричани „ротаторни фази“. Тези фази често са краткоживущи или метастабилни и се характеризират с далечен позиционен порядък, но молекулите имат известна свобода на ротация около дългата си ос. Ротаторните фази притежават особени вископластични свойства, които намират приложение в химическата индустрия и фармацията.<sup>1</sup> При емулсии от алкан-съдържащи капки в ротаторна фаза се наблюдава спонтанна промяна на геометричната форма на капките.<sup>1</sup> Това свойство може да бъде използвано при изграждането на сложни йерархични надмолекулни конструкции.<sup>2</sup> До момента структурните характеристики на ротаторните фази, както и ефектът върху тях от наличието на фазова граница, не са известни в детайли на молекулно ниво.

В настоящото изследване са проведени атомистични молекулодинамични симулации със силови полета CHARMM36/TIP4P за проследяване на процеса на замръзване в моделни системи съдържащи хексадекан в обем или в присъствие на ПАВ на водна повърхност. Разработена е процедура за идентифициране на отделните кристали в системите. Определена е собствената равнина на всеки кристалит и е измерен ъгълът на наклон на молекулите спрямо нея. Изчислен е и параметърът на порядък на алкиловите вериги. Глобалното структуриране на системите е характеризирано чрез радиалноразпределителни функции, а локалното – чрез анализ на Вороной. От получените резултати е заключено, че системите са с поликристалитна структура и отделните кристали са подредени в различна степен. Предложената методика позволява ефективно определяне на ключови структурни параметри в алкан-съдържащи системи в твърдо състояние.

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

Литература:

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.

## **СЕКЦИЯ ФИЗИКОХИМИЯ**

**Мария Тимпилова, ХФ – ПУ**

**Трифон Попов, МУ – София**

**Филип Маринов, ФХФ – СУ**

**Димитър Шандурков, ФХФ – СУ**

**СРАВНИТЕЛНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА ЕЛЕКТРОКАТАЛИТИЧНА АКТИВНОСТ НА Co-g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> МОДИФИЦИРАН ЕЛЕКТРОД – 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 засилен научно-изследователски интерес към модификация на проводящи материали с металооксидни наночастици, наночастици от благородни метали, въглеродни наноматериали и др. Изследванията показват, че след модификация освен промяна в химичната природа на проводящите материали се увеличава и тяхната специфична контактна повърхност.

Обект в настоящото изследване е разработване на електрод-катализатор на базата на стъкловъглерод (GCE) химически- модифициран с Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> – дотиран графитен карбонитрид (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>). За целта Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (5wt.%Co) е интегриран в слоестата 2d-структура на графитен въглероден нитрид (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>). Оптимизиран е състава на композита и методът на отлагане на модифициращата фаза върху повърхността на стъкловъглеродния електрод, както и времето за сушене.

Определени са потенциалите на електрохимична редукция и е изследвана електрокаталитичната активност на модифицирания електрод във водна среда с рН 3, 5 и 7 по отношение на водоразтворими хидропероксиди - водороден пероксид H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и третичен бутил хидропероксид (t-BHP). Установено е, че с понижаване киселинността на средата, скоростта на реакцията намалява, когато е използван полимер Nafion<sup>TM</sup> за образуване на филм върху композитната фаза. Проведени са аналогични изследвания, използван е полимеризирал глутаров алдехид за филм на модифицираната електродна повърхност, резултатите показват, че чувствителността на електродния сигнал минава през максимум при рН 5. Получените резултати показват, че по-подходящ електрод е модифицирания с глутаров алдехид поради по-висока чувствителност и по-висока химическа и механична стабилност.

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

## **ПОВЪРХНОСТЕН ЕЛЕКТРИЧЕН ПОТЕНЦИАЛ И ЕНЕРГИЯ НА АСОЦИАЦИЯ НА S-ПРОТЕИНА НА МУТАНТИТЕ НА КОРОНА-ВИРУСА С ACE2 РЕЦЕПТОРА НА ЕПИТЕЛНИТЕ КЛЕТКИ**

Трифон Т. Попов<sup>1</sup>, Венелин Д. Денчев<sup>1</sup>, Светлана Х. Христова<sup>1</sup>,  
Александър М. Живков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Катедра по медицинска физика и биофизика, Медицински университет - София, ул. „Здраве“ 2, София, България; [popov.trifon@gmail.com](mailto:popov.trifon@gmail.com); [svhristova@medfac.mu-sofia.bg](mailto:svhristova@medfac.mu-sofia.bg)

<sup>2</sup> Институт по физикохимия, Българска академия на науките, ул. „акад. Георги Бончев“ 11, София, България; [amzhivkov@gmail.com](mailto:amzhivkov@gmail.com)

Коронавирусът SARS-CoV-2 се свързва към отрицателно заредените ACE2 рецептори на епителните клетки чрез положително заредената S1-субединица на своя S-протеин. Енергията на асоциация се определя от локалния електричен потенциал на повърхността на двата протеина в областта на свързване. Всяка точкова мутация, водеща до промяна на броя и разположението на положително заредените аминокиселини ( $-\text{NH}_3^+$ ) и отрицателно заредените карбоксилни групи ( $-\text{COO}^-$ ) на аминокиселинните остатъци в областта на рецептор-свързващия домен (РСД) на S1-субединицата, променя електростатичния потенциал, а с това енергията на асоциация и заразността на мутанта.

Изследването се състои от 5 етапа: (1) избор на мутанти с промяна на електричните заряди в частта от полипептидната верига, формираща РСД: замяна на заредена с противоположно заредена или с незаредена аминокиселина, или обратното; (2) определяне на 3D координатите чрез мутационен анализ и реконструкция на структурата на S1-субединицата; (3) изчисляване на локалния електростатичния потенциал на S1-субединицата; (4) визуализация на електростатичния потенциал на повърхността на S1-субединицата; (5) изчисляване на енергията на S1-ACE2 асоциация.

Резултатите показват, че увеличаването на положителния сумарен заряд в РСД при четирите най-разпространени варианта на коронавируса: +3 (див тип), +4 ( $\beta$ -вариант), +5 ( $\delta$ -вариант) и +6 ( $\omicron$ -вариант), определя в този ред нарастваща енергия на свързване и заразност. рН-зависимостта на потенциала обуславя по-висока енергията на S1-ACE2 свързването в дихателните пътища (рН 5,5–6,5), но по-ниска в кръвоносните съдове (рН 7,4); това обяснява по-високата заразност, но по-ниската патогеност на варианта омикрон в сравнение с дивия щам и делта варианта.

*Изследването е финансирано от ФНИ (проект КП-06-М49/1 – 2020).*

## **ВЛИЯНИЕ НА ЙОНИЗИРАЩАТА РАДИАЦИЯ ВЪРХУ АКТИВНОСТТА НА ЕНЗИМА ИНВЕРТАЗА**

Филип Маринов<sup>1</sup>, Невена Царевска<sup>2</sup>, Константин Балашев<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Sofia University, Faculty of Chemistry and Pharmacy, Dept. Inorganic Chemistry, 1 James Bourchier Blvd. 1164 Sofia, Bulgaria, e-mail: fhkb@chem.uni-sofia.bg

<sup>2</sup> Medical University Sofia, 15 Acad. Ivan Geshov Blvd, 1431 Sofia, Bulgaria

<sup>3</sup> Sofia University, Faculty of Chemistry and Pharmacy, Dept. Inorganic Chemistry, 1 James Bourchier Blvd. 1164 Sofia, Bulgaria, e-mail: fhkb@chem.uni-sofia.bg

Известно е, че ефектът на йонизиращи лъчения върху ензими и ензимни системи, които са определящи за клетъчните функции, води до настъпването на химични промени в определени атомни групи в активните центрове на ензимните молекули, които впоследствие предизвикват инхибиране на техните активности. Затова от особена важност за разбирането на молекулните и кинетични механизми на действие на йонизиращото лъчение върху тези системи е да бъдат намерени подходящите експериментални протоколи и кинетични модели, които да се приложат при конкретни ензими и техните субстрати.

Настоящата работа е пример в това отношение, като в нея е изследвано влиянието на йонизиращата радиация върху каталитичното действие на ензима инвертаза със субстрат захароза и с използване на поляриметрични измервания като експериментален подход.

Предложен е експериментален протокол, който включва следните етапи: получаване на калибровъчна крива на зависимостта на концентрацията на захароза като функция от оптичния ъгъл на въртене и получаване на кинетични криви в хода на захарната инверсия на захароза под действие на ензима инвертаза и при различни дози на облъчване на ензимния разтвор. При така проведените експерименти са получени точните стойности на основните кинетични константи, характеризиращи ензимната кинетика при различни дози на облъчване (от 0,1 до 1 Gy) на ензимния разтвор, и са направени изводи за промените, които радиацията предизвиква в активния център на ензима

### Цитати:

1. Essel, K.K. and Osei, Y.D. Investigation of some kinetic properties of commercial invertase from yeast. Natural Products Chemistry & Research, 2014, 2:6.

2. Northrop, D.B. On the meaning of  $K_m$  and  $V/K$  in enzyme kinetics Journal of Chemical Education, 1998, 75-79

## **НОВИ МАТЕРИАЛИ С МНОГОЦВЕТНА ЕМИСИЯ: ФИЗИКОХИМИЧНИ И ОПТИЧНИ СВОЙСТВА**

Димитър Шандурков\*, Нина Данчова, Веселин Петров, Стоян Гуцов

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

Синтезирани са силикатни ( $\text{SiO}_2$ ) аерогелове с различна степен на хидрофобност, получени чрез хидролиза на тетраетокси силан (TEOS), хидрофобизация и субкритично сушене при стайна температура и  $p=100$  mbar. Изследвани са спектралните и физикохимичните свойства на получените материали. Инфрачервените спектри и нискотемпературните изотерми на адсорбция-десорбция на азот показват структурни изменения в матриците на гелове в зависимост от степента на хидрофобизация. Интензитетите на ивиците на трептенията на хидрофилните Si-OH групи от силикатните гелове намаляват с увеличаване хидрофобността на гела, а се появяват ивици свързани със Si-CH трептения. Нискотемпературните изотерми показват промяна във формата на порите на гела и текстурата на матрицата, последната описана чрез фрактален коефициент [1].

Охарактеризираните аерогелни матрици са дотирани с комплексът  $[\text{Eu}(\text{phen})_2](\text{NO}_3)_3$  (phen = 1,10-фенантролин). Получените композитни материали са изследвани чрез луминесцентна спектроскопия и рентгеноструктурен анализ. Квантовият добив на тези материали силно зависи от степента на хидрофобност на матрицата. Спектроскопските и рентгенографските данни говорят за промяна в геометрията на структурата на комплекса, намиращ се в силикатната матрица, спрямо чистия прахообразен комплекс. Изчислени са цветните координати на емисията на получените композитни материали [2,3].

### Цитати:

1. D. Shandurkov, P. Ignatov, I. Spassova, S. Gutzov, Spectral and texture properties of hydrophobic aerogel powders obtained from room temperature drying, *Molecules*. 26 (2021) 1–12. <https://doi.org/10.3390/molecules26061796>.
2. T. Zahariev, D. Shandurkov, S. Gutzov, N. Trendafilova, D. Enseling, T. Jüstel, I. Georgieva, Phenanthroline chromophore as efficient antenna for  $\text{Tb}^{3+}$  green luminescence: A theoretical study, *Dye. Pigment*. 185 (2020) 108890.
3. S. Gutzov, D. Shandurkov, N. Danchova, D. Enseling, T. Jüstel, Preparation and optical properties of functionalized hydrophobic aerogel granules, *SPIE Proc.* 11332 (2019). <https://doi.org/10.1117/12.2552727>.

## **СЕКЦИЯ АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ**

**Николай Петков, ФХФ - СУ**

**Росица Костандиева, ХЛ - ВМА**

**Ива Беловеждова, ФХФ- СУ**

**Димитър Стоицов, ХФ - ПУ**

**Георги Василев, ФХФ - СУ**

**Ралица Пуртева, ФХФ - СУ**

## **КОМПЛЕКСООБРАЗУВАНЕ НА АНТИБИОТИЦИТЕ МОНЕНЗИН И САЛИНОМИЦИН С ЙОНИ НА ЦЕРИЙ**

Николай Петков, Ивайла Панчева

*Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“,  
бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164 София  
n.petkov73@abv.bg, ahip@chem.uni-sofia.bg*

Изследване върху употребата на антибиотици в хуманната медицина за последните 20 години сочи, че ползването им е нараснало с близо 50 процента. Това пряко корелира с нарастващия дял на резистентните бактериални щамове, което налага разработването на нови биологично активни вещества. Освен в терапията на бактериални инфекции, антибиотиците намират приложение и в химиотерапията на неопластичните заболявания. Изследване върху тяхното разпространение и смъртността от 2020 година, показва, че за последната година се наблюдава значителен ръст в леталитета и новодиагностицираните случаи на неопластични заболявания.

Клас вещества с антибактериални свойства, представители на който показват обещаващи характеристики в повлияване туморния растеж и развитие, е този на йонофорните антибиотици. Той включва в себе си няколко групи молекули, които споделят обща характеристика в механизма си на действие – извършват трансмембранен пренос на катиони на алкални метали, като така повлияват хидростатичното налягане в интрацелуларното пространство и водят до клетъчна смърт. Представители на тази група са антибиотиците монензин и салиномицин.

С цел потенциране цитотоксичните и антибактериалните свойства на изходните лиганди – антибиотиците монензин и салиномицин, са синтезирани четири нови комплекса с йони на церий в най-високата му степен на окисление. За установяване тяхната структура са използвани спектрални и термични методи за анализ. За някои от комплексите предложените структури са моделирани чрез квантовохимични изчисления. Изследвани са промените в минималната инхибираща концентрация спрямо изходните лиганди върху три аеробни бактериални щама по метода „дифузия в агар“.

*Благодарности: Изследванията са извършени с финансовата подкрепа на Фонд „Научни изследвания“ (проект № КП-06-Н-29/3).*



## **ЖЛЪЧКАТА КАТО АЛТЕРНАТИВНА ПРОБА ПРИ *POSTMORTEM* СКРИНИНГОВ АНАЛИЗ**

Росица Костандиева<sup>1</sup>, Силвия Стойкова<sup>1,2</sup>, Иво Иванов<sup>1,2</sup>, Васил Атанасов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Военномедицинска академия – София, Химикотоксикологична лаборатория, Катедра Токсикология ул. "Св. Георги Софийски" № 3, София, България

<sup>2</sup> Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра Аналитична химия, бул. "Джеймс Баучер" № 1, София, България

*e-mail: rositsa.kostandieva@gmail.com*

Токсикологичният анализ на проби от починали лица поставя редица предизвикателства – липсва предварителна информация по случая, често пъти класическите проби кръв и урина не са налични, а в повечето случаи е и налице протичащ разложителен процес и/или *postmortem* преразпределение на ксенобиотиците. По тази причина анализът на алтернативни проби като коса, нокти, вътреочна течност, подкожна мазнина, мускулна тъкан, жлъчка и др. се използва все по-често в съдебната токсикология през последните години.

Жлъчката представлява тъмнозелена до жълтеникаво-кафява течност, която се произвежда в черния дроб. Редица ксенобиотици и техни метаболити присъстват в нея в сравнително високи концентрации, което я прави изключително подходяща проба за скринингов анализ, особено при липса на проба урина или компрометирана такава.

В настоящето изследване е извършен сравнителен скринингов анализ на жлъчно съдържимо, взето при аутопсията на труп, от лице след полимедикаментозно самоотравяне и последвала смърт. Предварителната пробоподготовка включва алкална хидролиза (10 М КОН) или ензимна хидролиза ( $\beta$ -глюкуронидаза и/или арил-сулфатаза) при различни условия на ензимната реакция (рН 4.5 и/или рН 6.0). След течна-течна екстракция в алкална среда е извършен GC-MS скринингов анализ и е направено сравнение на получените резултати с цел оптимизиране на аналитичната процедура.

При изследването са идентифицирани редица лекарствени вещества (венлафаксин, бизопролол, кветиапин, нифедипин и др.) и/или техни метаболити, като е установено, че ензимната хидролиза ( $\beta$ -глюкуронидаза и/или арил-сулфатаза) води до значително по-добри резултати от неспецифичната алкална хидролиза.

## **ИЗСЛЕДВАНЕ НА ВЪЗМОЖНОСТИТЕ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА ПРИ LA-ICP-MS АНАЛИЗ НА ПРОБИ ОТ ОТПАДЪЦИ**

Ива Беловеждова<sup>1</sup>, Валентина Любомирова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *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*

LA-ICP-MS е широко използван метод за мултиелементен анализ на проби в твърдо състояние. При приложението му за количествен анализ редица фактори като ефект от матрицата, фракциониране и дрейфа на чувствителността, стратегията за калибриране и др. повлияват върху точността. Най-сериозното ограничение при количествен анализ на проби от околната среда е липсата на твърд сертифициран референтен материал (CRM) с подходяща геометрия за калибриране и оценка на точността.

В литературата са изследвани различни подходи за калибриране: с помощта на стандартни разтвори, стъклени стандарти на NIST, силициев зол-гел, твърди матрично-наподобени стандарти, приготвени чрез добавяне на елементите или използване на CRM. Наличните CRM от екологични проби, отпадъци т.н. са предимно в прахообразно състояние, което изисква предварителното им таблетирание с подходящо свързващо вещество. Рутинна практика за подготовка на таблетки е използването на KBr, което при анализ с LA-ICP-MS е неприложимо, поради наличие на йонизационно пречене.

В настоящата работа са изследвани възможностите за използване на различни свързващи вещества при анализ на CRM и проби от отпадъчни материали и са оценени хомогенността на таблетките и точността при анализ на макро-, микро- и следови елементи.

### **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.*

## **PVG-MSIS-MP-AES МЕТОД ЗА ОПРЕДЕЛЯНЕ НА ЖИВАК**

Димитър Стоицов, Веселин Кметов

*Химически факултет при ПУ „Паисий Хилендарски“, катедра Аналитична химия и  
компютърна химия, Пловдив 4000, ул. “Цар Асен 24”,  
stoitsov@uni-plovdiv.bg , kmetov@uni-plovdiv.bg*

За първи път е предложено комбинирането на метод за фотоиндуцирано генериране на живачни пари под действие на UV-C лъчение за количествено определяне на Hg и газотечен сепаратор - мултирежимна пробовъвеждаща система (MSIS)<sup>®</sup> и атомноемисионен спектрометър с микровълново генерирана плазма в азотна среда (MP-AES). Оптимизирани са параметрите оказващи значимо влияние върху чувствителността за определяне на Hg ( $\lambda_{\text{емис.}} 253.663 \text{ nm}$ ): i) ефективността на генериране на живачни пари в UV-C реактора; ii) маспреноса им до плазмения източник за възбуждане. Проучено е влиянието на концентрацията на карбоксилната киселина и типа (HCOOH; CH<sub>3</sub>COOH и смес от двете), както и времето на облъчване на реакционната смес в UV-C реактора и скоростта на N<sub>2</sub> носещия газ в MSIS. Резултатите за моделни разтвори показват, че е възможно постигане на инструментална граница на откриване под 1 ppb, което съществено подобрява способностите на MP-AES за определяне на ниски концентрации на живак.

## **КОЛИЧЕСТВЕНО ОПРЕДЕЛЯНЕ НА НЕОРГАНИЧНИ АНИОНИ В ПОВЪРХНОСТНИ И ПИТЕЙНИ ВОДИ С ПОМОЩТА НА ЙОННА ХРОМАТОГРАФИЯ**

Георги Василев, Вероника Михайлова

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,  
гр. София, бул. „Джеймс Баучер“ 1, ПК 1164, gvassilev1199@gmail.com*

Качеството на повърхностните води и тези за питейно-битови нужди постоянно се следи, като необходимите показатели, отговорни за качеството им са регламентирани в наредби за качеството на водата, предназначена за питейно-битови цели на Република България. Във водите от природни водоизточници от катионите преобладават  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  и  $\text{Mg}^{2+}$ , а от анионите –  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ . Освен тях се следят  $\text{F}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ ,  $\text{SCN}^-$  и  $\text{CN}^-$ . Наличието на нитрати и нитрити във води е нежелателно, тъй като оказват вредно влияние върху човешкото здраве. Също така е добре известно, че  $\text{CN}^-$  за разлика от  $\text{SCN}^-$  имат остри токсични и смъртоносни ефекти върху живите организми в това число и човекът.

В настоящето изследване беше създаден и оптимизиран инструментален метод за разделянето и количественото определяне на неорганични аниони в повърхностни и питейни води с помощта на йонна хроматография. Определени са аналитичните характеристики на предложения инструментален метод. Разработена е процедура за окисление на цианиди до цианати, като са определени оптималните експериментални условия за това окисление. Постигнатите ниски LOD и LOQ на анализирани неорганични аниони позволява тяхното откриване и количествено определяне в повърхности и питейни води.

**Благодарности:** Тази работа е част от проект BG05M2OP001-1.002-0019: „Чисти технологии за устойчива околна среда – вода, отпадъци, енергия за кръгова икономика“ (Clean&Circle) 2018 – 2023 г., за развитие на Център за компетентност, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“ 2014-2020 г., съфинансиран от Европейския съюз чрез европейските структурни и инвестиционни фондове.

## **МИГРАЦИЯ НА ЕЛЕМЕНТИ В СИСТЕМИТЕ БЕНТОНИТ-МОДЕЛЕН РАЗТВОР И БЕНТОНИТ-ВИНО**

Ралица Пуртева<sup>1</sup>, Елисавета Младенова<sup>2</sup>, Иван Бакърджийски<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, 2227 гр. София, бул. „Джеймс Баучер“ 1, [ralicapurteva@gmail.com](mailto:ralicapurteva@gmail.com)

<sup>2</sup> Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, 2227 гр. София, бул. „Джеймс Баучер“ 1, [elimladenova@chem.uni-sofia.bg](mailto:elimladenova@chem.uni-sofia.bg)

<sup>3</sup> Университет по хранителни технологии, Технологичен факултет, Катедра „Технология на виното и пивото“, 4002 гр. Пловдив, бул. „Марица“ 26, [ivanbak@uft-plovdiv.bg](mailto:ivanbak@uft-plovdiv.bg)

Виното е природен продукт, получен в резултат на метаболизма на лозовото растение и винените дрожди. В зависимост от приложената технология за преработка на гроздето и получаване на виното, условията на съхранение и/или стареене, броят и видът на обработките имат значително влияние върху изменението на минералния състав на бъдещото вино. Обработката с бентонит е тази, която внася най-съществени промени във физико-химичния състав на бъдещото вино, като в промишлен мащаб няма аналог по отношение на колоидната стабилизация на белите и розе вината. Бентонитът притежава силен капацитет както да сорбира, така и да отделя елементи от състава си, което означава, че той може да модифицира в по-малка, или по-голяма степен, минералния състав на бъдещото вино. В настоящата работа е изследвана степента на миграция на някои елементи в системите бентонит-моделен разтвор и бентонит-вино. Разработени са 17 проби моделен разтвор и 17 проби вино розе. Изследвано е влиянието на вида на използвания бентонит, като са вложени само бентонити, достъпни на български пазар. Обърнато е внимание на миграцията на елементи, които са важни за здравето на виното, като Fe, Mn, Zn. Изследвано е съдържанието и на някои потенциално токсични елементи (като Cd, Ni, Pb), както и на някои редкоземни елементи (като La, Sm). За количественото определяне на избраните елементи са използвани инструменталните техники ICP-OES и ICP-MS в зависимост от концентрационното съдържание на елементите.

### **Благодарности:**

Авторите любезно изказват своята благодарност към Фонд „Научни изследвания“ при Софийски университет „Св. Климент Охридски“ за полученото финансиране на проектното си предложение „Миграция на елементи в системите бентонит-моделна среда и бентонит-вино в контекста на запазване на натуралността и качеството на виното“ от конкурсна сесия 2022.

## **СЕКЦИЯ ПОЛИМЕРИ**

**Николай Петров, ФХФ - СУ**

**Кюдратло Сахибудинов, ХТМУ**

## **ВЛИЯНИЕ НА PH И СОЛЕВАТА КОНЦЕНТРАЦИЯ ВЪРХУ СПОСОБНОСТТА НА ПОЛИЦВИТЕРЙОННИ ДВУСЛОЙНИ ХИДРОГЕЛОВЕ ДА ПРОМЕНЯТ КОНТРОЛИРАНО ФОРМАТА СИ**

Николай Петров, Констанс Русева, Елена Василева

*Лаборатория по структура и свойства на полимерите, Катедра по фармацевтична и приложна органична химия, Факултет по химия и фармация, СУ“Св. Кл. Охридски“, бул. „Дж. Баучер“ No 1, 1164 София, България, e-mail:nikolaigp96@gmail.com*

Полицвитерйоните (ПЦЙ) са клас полимери със специфична цвитерйонна структура. Всяко ПЦЙ мономерно звено носи равен брой ковалентно свързани отрицателно и положително заредени функционални групи в страничната си верига, като нетния заряд на ПЦЙ е нула при неутрални условия. Промени в параметрите на околната среда като температура, киселинност, солева концентрация и др. стимулират могат до доведат до промяна на наетни зарчд на ПЦЙ, т.е. те обратимо се зареждат положително или отрицателно. Това води до обратими промени в техните свойства, което ги определя като „интелигентни“ полимери. Например, поликарбоксибетаините (ПКБ) откликват обратимо на промени в киселинността на средата, докато полисулфобетаините (ПСБ) са температурно чувствителни. И двата типа полимери набъбват ш по-голяма степен в присъствие на соли, отколкото във вода. т.е. проявяват антиполиелектролитен ефект.

Получаването на бислойни полимерни хидрогелове, в които върху един полимерен слой с дефинирани свойства е отложен друг полимер с други свойства е съвременен подход за получаване на интелигентни полимерни материали с обратима промяна на формата. Тези материали намират приложения като адаптивни оптични лещи, променящи „интелигентно“ фокусното разстояние, „интелигентни“ клапани и контролери за управление на поток от течности или частици, както и като стентове в медицината.

В настоящата работа е получен за първи път двуслоен ПЦЙ хидрогел, изграден от слоеве от ПКБ и ПСБ. Изследвано е влиянието на рН и солевата концентрация както поотделно така и в комбинация върху способността на двуслойния хидрогел да променя формата си. Показана е способността на ПКБ/ПСБ двуслойните хидрогелове да откликват „интелигентно“ на промяната в параметрите на околната среда циклично, в рамките на серия от 5 цикъла, като те демонстрират „памет“ да възвръщат формата си при съответните условия.

## **РАЗРАБОТВАНЕ НА СМОЛИ ЗА СТЕРЕОЛИТЕОГРАФСКО БИОПРИНТИРАНЕ НА ОРГАН-В-ЧИП**

Кюдратло Сахибуди<sup>1,2</sup>, Християна Сараджова<sup>1</sup>, Тодор Иванов<sup>2</sup>, Мурад Реджеб<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> *МатриКем ООД, ул. „Акад. Георги Бончев“ 103А*

<sup>2</sup> *Химикотехнологичен и металургичен университет, Катедра Биотехнологии, Бул. "Свети Климент Охридски" 8, kodrad@mail.bg*

За адресиране на високите разходи при разработване на лекарства е нужно разработването на *in vitro* тъканни модели, съдържащи човешки клетки и позволяващи по-добро прогнозиране на лекарствената ефикасност и токсичност преди започване на клинични изпитвания.[1] Съществена пречка пред създаването на биомиметична тъкан е ефективното симулиране на функцията на васкуларната система, осигуряваща обмен на газове и хранителни вещества между клетките и околната среда.[2] Най-обещаващите решения произтичат от стереолитографското биопринтере, което комбинира напредъка в литографията, полимерното инженерство и клетъчната биология. Този вид принтиране позволява прецизното пространствено асемблиране на полимери, биоактивни фактори и клетки в продукти на тъканното инженерство, включително микрофлуидни системи тип орган-в-чип. Напредъкът му обаче е ограничен от малкия избор на фоточувствителни полимери и техни разтвори (смоли), оптимизирани за прецизно 3D биопринтере.

Този доклад ще представи резултати от разработката на цитосъвместими смоли за стереолитографско биопринтере на основата на полиетиленгликол и желатин. Синтетичният полимер е фотосенситизиран чрез функционализиране с акрилатни групи (PEGDA), а биополимерът – с метакрилатни групи (GelMA). Сравнително ниската молекулна маса ( $M_r < 2000 \text{ g/mol}$ ) на PEGDA позволява получаването на смоли с нисък вискозитет дори при висока концентрация на полимера, което позволява принтиране на комплексни микрофлуидни структури в рамките на минути. От друга страна, високата степен на функционализиране на GelMA определя както високата му фоточувствителността, така и намалената му възможност му за физическо желиране и съответно ниския вискозитет на формулираните смоли. Чрез рационално оптимизиране на съотношението на фотоинициатор, фотоабсорбатор и светлочувствителен полимер са разработени смоли, позволяващи прецизното триизмерно биопринтере на комплексни микрофлуидни структури, подходящи за *in vitro* моделиране на човешки тъкани.

Цитати:

1. B. Zhang, A. Korolj, B. F. L. Lai, and M. Radisic, *Nat. Rev. Mater.* **3**, 257 (2018).

2. R. W. Barrs, J. Jia, S. E. Silver, M. Yost, and Y. Mei, *Chem. Rev.* **120**, 10887 (2020).



## **СЕКЦИЯ ХИМИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ И ИНЖЕНЕРНА ХИМИЯ**

**Мартин Пантов, ФХФ - СУ**

**Александра Тодорова, ФХФ - СУ**

**Анита Бисерова, ФХФ - СУ**

**Десислава Глушкова, ФХФ - СУ**

**Татяна Славова, ФХФ - СУ**

**Вяра Йорданова, ФХФ - СУ**

**Памела Петрова, ФХФ - СУ**

**Петър Борисов, ФХФ - СУ**

**Боян Пейчев, Queen Mary University of London**

**Борис Константинов, ФХФ - СУ**

**Ралица Узунова, ФХФ - СУ**

**Никола Генчев, ФХФ - СУ**

**Васил Георгиев, ФХФ - СУ**

**Кръстина Стефанова, ФХФ - СУ**

**Росена Крушовалиева, ФХФ - СУ**

**Владимир Петков, ФХФ - СУ**

**Делян Кръстев, ФХФ - СУ**

## **РОТАТОРНИ ФАЗИ В СМЕСЕНИ АЛКАНОВИ КАПКИ**

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 \*тер@lcre.uni-sofia.bg*

Охлаждането на смеси от алкани води до образуването на междинни ротаторни фази, съществуващи в широк температурен диапазон между изотропното течно състояние и напълно подредената кристална фаза [1]. Молекулите в ротаторна фаза образуват слоеста структура, но позициите им в слоевете не са изцяло фиксирани, а се наблюдава известна ротационна свобода. В предишни изследвания беше показано, че при охлаждане на емулсионни капки от смесени алкани се наблюдава сходен процес, при който в целия обем на капката може да се образува пластична ротаторна фаза [2].

Целта на настоящото изследване е да бъде получена структурна информация за подреждането на молекулите в хода на охлаждане на смесени алканови емулсионни капки, както и да се определят факторите, влияещи върху него. Използваният експериментален метод е рентгеново разсейване (SAXS/WAXS) със синхротронен източник на лъчение.

Получените резултати показват, че при всички изследвани системи се наблюдава образуване на една или няколко смесени ротаторни фази с дебелина на слоя, междинна на тази за чистите алкани, съставлящи сместа. При понижение на температурата се наблюдава преместване на пика за ротаторна фаза, съответстващо на продължаващо намаление на междуплоскостното разстояние. Този ефект зависи от адсорбционния слой от повърхностно-активно вещество и кривината на капките. Съставът на смесите повлиява скоростта на достигане на системата до крайната подредена фаза, температурата, при която се образува тази фаза, както и крайното характерно разстояние в образувалата се ротаторна фаза. В зависимост от разликата в дължините на алканите в сместа се наблюдава формирането на една смесена ротаторна фаза или съвместното съществуване на няколко смесени фази.

1. Cholakova, D. & Denkov, N., *Adv. Colloid Interface Sci.*, 2019, 269, 7-42.
2. Cholakova, D. et al, *Langmuir*, 2017, 33, 5696-5706

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

## **РЕОЛОГИЧНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ НА ОБЕМНИ РОТАТОРНИ ФАЗИ НА ЛИНЕЙНИ АЛКАНИ**

Александра Тодорова\*, 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, \*at@icpe.uni-sofia.bg*

При охлаждане дълговерижните алкани образуват ротаторна фаза, в която молекулите се характеризират с далечен порядък на подреждане в пространството по отношение на транслационната си степен на свобода, но могат да се въртят около оста си. Поради това ротаторните фази се разглеждат като междинни между твърдото и течното състояние [1]. Реологичното поведение на ротаторните фази зависи както от температурата на преохлаждане, така и от дължината на въглеродородната верига, като е показано, че модулът на еластичност намалява с нарастване на дължината на веригата, поради образуването на повече дефекти при охлаждане на дълговерижните алкани [2].

Целта на настоящето изследване е да се охарактеризират детайлни реологичните свойства на ротаторните фази за два дълговерижни линейни алкана: нонадекан ( $C_{19}H_{40}$ ) и октакозан ( $C_{28}H_{58}$ ). За целта са проведени реологични експерименти, при които е измерено напрежението при зададена деформация както и експерименти, при които е измерена деформацията при зададено напрежение при различни температури, подбрани в рамките на интервала на съществуване на ротаторните фази за двата алкана. Получените резултати са обработени със съставен модел, включващ последователно свързани Максвелов елемент ( $G_0, \mu_0$ ) и два Келвинови елемента ( $G_{1,2}; \mu_{1,2}$ ), които се характеризират с константи на еластичност,  $G_i$  и вискозитети,  $\mu_i$ , определени от най-доброто напасване на експерименталните данни. При нонадекана се наблюдава повишение на константата на еластичност от Максвеловия елемент при понижаване на температурата в интервала от 21 до 28 °C, докато еластичностите, характеризиращи Келвиновите елементи, остават постоянни. При октакозана и трите еластичности намаляват с повишаване на температурата в интервала от 56 до 60 °C. Релаксационните времена и за двата изследвани алкана не зависят съществено от температурата.

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

[1] D. Cholakova, N. Denkov, *Adv. Colloid Interface Sci.*, 269 (2019) 7-42.

[2] D. Cholakova, K. Tsvetkova, S. Tcholakova, N. Denkov, *Colloids Surf. A*, 634 (2022) 127926.

## **РОЛЯ НА АДСОРБЦИОННИЯ СЛОЙ НА ПАВ ЗА СТАБИЛНОСТТА НА НЕСФЕРИЧНИ АЛКАНОВИ КАПКИ**

Анита Бисерова\*, Десислава Глушкова, 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, ab@icpe.uni-sofia.bg*

Наскоро беше показано, че алканови емулсионни капки, стабилизирани от дълговерижни повърхностно-активни вещества (ПАВ), се деформират спонтанно при охлаждане. Основните форми, през които преминават капките, са: сфера → правилни или неправилни обемни многостени → плоски призматични многостени (шестоъгълни, четириъгълни и триъгълни) → пръчковидни форми и тънки нишки [1]. Образоването на тези форми е резултат от формирането на тънки слоеве от пластични ротаторни фази по повърхността на капките. Към момента е изследвано поведението на такива капки единствено при постоянна скорост на охлаждане на емулсиите.

Целта на настоящето изследване е да определи дали наблюдаваните деформирани флуидни частици са кинетично или термодинамично стабилни при дадена температура, както и факторите, определящи стабилността. Затова, проведехме моделни експерименти, при които бе изследвано поведението на алканови капки в различни несферични форми при фиксирана температура.

Експериментите показаха, че някои от формите на алкановите капки могат да се запазят в емулсии, стабилизирани с нейонни ПАВ с тесни вариации в състава. Такива форми, които не претърпяват деформации при постоянна температура, са равностранный триъгълни призми, както и пръчковидните частици. При всички останали форми наблюдавахме продължаваща еволюция до една от двете стабилни форми или тънки нишки. В емулсиите, стабилизирани с ПАВ с техническа чистота, наблюдавахме продължаващо развитие на всички форми по описаната по-горе последователност. Наблюдаваната разлика от типа ПАВ бе обяснена със състава на адсорбционния слой от ПАВ. Скоростта на промените във формите на капките се определя още от преохлаждането в системата и от първоначалния размер на капките.

*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).*

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

## ФАЗОВО ПОВЕДЕНИЕ НА НАТРИЕВ ДОДЕЦИЛБЕНЗЕНСУЛФОНАТ В СМЕСИ ОТ ВОДА И ОРГАНИЧЕН РАЗТВОРИТЕЛ

Десислава Глушкова\*, Анита Бисерова, Диана Чолакова, Славка Чолакова

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

Амфифилните молекули на повърхностно-активните вещества (ПАВ) спонтанно образуват агрегати във вода. Видът на формираните агрегати зависи от параметъра на опаковане,  $p$ , който се дефинира като отношението на площта, която заема хидрофобната опашка към площта, която заема хидрофилната глава на повърхността на агрегата. Площта на хидрофилните глави в агрегатите на йонни ПАВ зависи от концентрацията на електролит, диелектричната константа на средата и стеричното отблъскване между главите. Замяната на водата с органичен разтворител променя съществено отблъскването между главите, привличането между опашките и фазовото поведение на системите.

В настоящата работа изследваме фазовото поведение на анионния натриев додецилбензенсулфонат (NaLAS), диспергиран в смеси на вода и различни органични разтворители – глицерол, етилен гликол, пропилен гликол, дипропилен гликол, етанол и 2-пропанол. Установихме, че замяната на вода с разтворител променя фазовото поведение на системата при междинни концентрации на ПАВ. Диспергирането на 20 wt. % NaLAS в дейонизирана вода или в чист органичен разтворител води до получаване на двуфазни системи с течно-кристални ламеларни фази. За разлика от това при смесването на разтворител и вода (за същата концентрация на ПАВ) съществува диапазон, в който се получават изотропни мицеларни разтвори с нисък вискозитет. Граничните концентрации на разтворител за получаване на изотропна фаза се определят от свойствата на средата. При разтворители с по-ниски диелектрични константи мицеларни разтвори се получават в тесен диапазон при ниски концентрации на разтворител във водата. При разтворители с по-висока диелектрична константа са необходими по-високи концентрации на разтворител във водната смес за стабилизиране на изотропните фази, но диапазонът им на съществуване е по-широк.

**Благодарност:** Тази работа е частично финансирана от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове, проект BG05M2OP001-1.002-0012 “Устойчиво оползотворяване на биоресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти”.

## **РАЗТВОРИМОСТ НА ЙОННИ ПОВЪРХНОСТНО-АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА ПОД ТЕМПЕРАТУРАТА ИМ НА КРАФТ В СМЕСЕНИ МИЦЕЛАРНИ РАЗТВОРИ: ФАЗОВИ ДИАГРАМИ ЗА МЕТИЛ ЕСТЕР СУЛФОНАТИ И НЕЙОННИ КОСЪРФАКТАНТИ**

Татяна Славова, Красимир Данов, Румяна Станимирова, Вероника Яврукова

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

Голяма част от йонните повърхностно-активни вещества, които намират широко приложение в продуктите за лична хигиена и домакинството, имат ограничена растворимост във вода при ниски температури (температура на Крафт). Този недостатък може да бъде преодолян чрез използването на смеси от повърхностно активни вещества (йонни и нейонни) с добра растворимост при ниски температури, където се образуват смесени мицели.

Проведени бяха измервания на растворимостта и проводимостта на смеси от анионен метил естер сулфонат (MES) и нейонен алкил полиглюкозид и алкил полиоксиетилен етер при 5 °C след съхранение за дълъг период от време. Бяха изчислени фазовите диаграми, като за целта бе разработен и проверен експериментално теоретичен модел за тяхното обяснение [1].

Фазовите диаграми включват следните фазови области: смесени мицели; мицели и кристали; кристали, и молекулен разтвор. Получените резултати биха могли да увеличат приложимостта на MES, който има сравнително висока температура на Крафт, но и много полезни свойства като отлична биоразградимост и кожна съвместимост; стабилност при твърда вода; добро омокряне и почистване на повърхности.

[1] K.D. Danov, R.D. Stanimirova, P.A. Kralchevsky, T.G. Slavova, V.I. Yavrukova, Y.W. Ung, E. Tan, H. Xu, J.T. Petkov, J. Colloid Interf. Sci. 601 (2021) 474–485.

## РЕОЛОГИЯ НА РАЗТВОРИ НА ПАВ: РОЛЯ НА ПРОТИВОЙОНА И ГЛАВАТА НА СЪРФАКТАНТА

Вяра Йорданова, Златина Митринова, Славка Чолакова

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

Реологичното поведение на разтвори на йонни повърхностно-активни вещества (ПАВ) се повлиява от добавянето на соли, които екранират електростатичното отблъскване между главите на ПАВ и променят формата на агрегатите в разтвора. За йонни сърфактанти, при които се образуват нишковидни мицели с добавянето на електролит, вискозитетът на разтвора минава през максимум като функция на концентрацията на солта. Показано е, че типът на противойон оказва влияние върху позицията и максимума на солевата крива както за разтворите на SLES [1], така и за техните смеси с SLES+CAPB [2].

Целта на настоящото изследване е да се определи ефектът на противойона за серия от анионни повърхностно-активни вещества с различни хидрофилни глави. За целта изследвахме влиянието на четири соли NaCl, MgCl<sub>2</sub>, MgSO<sub>4</sub>, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> върху реологичното поведение на 5 йонни сърфактанта : PAS (натриев алкил сулфат); SLES 1EO (натриев додецил етер сулфат с 1 етоксигрупа); SLES 2EO (натриев додецил етер сулфат с 2 етоксигрупи), NaLAS (натриев додецил бензен сулфонат); AOS (алфа олефин сулфонат). Получените резултати показваха, че в зависимост от главата на ПАВ при добавяне на електролит в системата могат да се образуват мултиламеларни весикули или нишковидни мицели. Когато се образуват мултиламеларни весикули вискозитетът нараства слабо при добавянето на страничен електролит, докато при образуването на нишковидни мицели нарастването на вискозитета е силно изразено. Ефективността на изследваните електролити за достигане на максимума в солевата крива намалява в реда: MgCl<sub>2</sub> > NaCl > MgSO<sub>4</sub> > Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

**Благодарност:** Тази работа е частично финансирана от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове, проект BG05M2OP001-1.002-0012 “Устойчиво оползотворяване на био-ресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти”.

### Литература:

1. M. Pleines et al. , *Journal of Colloid and Interface Science* 537 (2019) 682–693
2. Z. Mitrinova et.al. *Colloids Surf. A* **643** (2022) 128746

## РЕОЛОГИЯ НА АНИОННИ/ЦВИТЕРЙОННИ СМЕСИ: ЕФЕКТ НА КО-ЙОНИТЕ

Памела К. Петрова, Славка С. Чолакова, Светослав Е. Аначков

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

Реологията на смеси от анионни и цвистерйонни ПАВ силно зависи от концентрацията на противойона (напр.  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ), но неорганичните ко-йони също играят важна роля, тъй като влияят на средната йонна активност (коефициент на активност).

В нашето изследване, приготвихме разтвори на ПАВ, съдържащи натриев лаурилетерсулфат с една етилен оксидна група (SLES-1EO; анионен) и кокаמידо-пропилбетаин (CAPB; цвистерйонен), с масово съотношение 3/1 SLES-1EO/CAPB и 12 wt% обща концентрация на ПАВ. Изследвахме ефекта от  $\text{Na}^+$  и  $\text{K}^+$  соли с различни ко-йони върху реологията и структурата на мицеларните разтвори. Свойствата им 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  $\eta_0$  и релаксационното време  $\tau_R$  минават през максимуми като функции на  $c_{\text{Na}}$  и  $c_{\text{K}}$ , чиито позиции зависят от вида на ко-йона. Концентрацията на противойона,  $c_{\text{Na}}$  или  $c_{\text{K}}$ , в максимума нараства в следния ред:  $\text{Cl}^- \approx \text{Br}^- \approx \text{I}^- \approx \text{H}_2\text{PO}_4^- < \text{NO}_3^- < \text{ClO}_4^- < \text{SO}_4^{2-}$ . В същия ред, средният коефициент на активност намалява, т.е. необходими са по-високи  $c_{\text{Na}}$  и  $c_{\text{K}}$ , за да достигнем същата активност. От друга страна, еластичността  $G_0$  нараства монотонно с  $c_{\text{Na}}$  и  $c_{\text{K}}$  и слабо зависи от вида на ко-йона. Освен това, характерното време за разкъсване на мицелите  $\tau_{br}$  намалява с  $c_{\text{Na}}$  и  $c_{\text{K}}$ , тъй като мицелите нарастват (преди максимума) или поради образуване на разклонени мицели (след максимума). Чрез оптична микроскопия в поляризирана светлина, установихме, че всички разтвори са изотропни мицеларни фази, а не течно-кристални структури. В заключение, ко-йоните слабо повлияват мицеларната реология, но могат да променят съществено разтворимостта на солите или да намалят ефектите на корозия на оборудването.

**Благодарност:** *Работата е частично финансирана от ОП „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от ЕС, проект BG05M2OP001-1.002-0012 „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти“.*



## РЕОЛОГИЧНО ПОВЕДЕНИЕ НА РАЗТВОРИТЕ НА ЕСЦИН

Петър Борисов, Фатмегюл Мустан-Борисова, Златина Митринова, Славка Чолакова

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

Есцинът е тритерпеноиден сапонин, който се извлича от семената на дивите кестени. Молекулата на есцина е амфифилна, което обуславя голямата му повърхностна активност и получаването на адсорбционни слоеве с нетривиално реологично поведение [1-2]. Водните разтвори на есцин имат натурално рН  $\approx 4$ , при което карбоксилната група в молекулата на есцина е незаредена, докато при повишаване на рН, карбоксилната група се йонизира и есцинът проявява свойствата на анионен сърфактант. Целта на настоящето изследване е да се изясни ролята на добавянето на страничен електролит върху реологичното поведение на разтворите на есцин при различни стойности на рН. За целта са проведени експерименти при рН 4; 6 и 8 с различни соли. Показано е, че есцинът се разтваря напълно и прави бистри разтвори с нисък вискозитет – сравним с този на водата при високи рН, докато при рН = 4 разтворимостта му е силно ограничена. Добавянето на електролит не променя реологията на разтворите с рН = 4, но води до нарастване на вискозитетите на разтворите при рН 6 и 8, при което вискозитетът на разтворите, като функция на йонната сила, минава през максимум. Повишаването на вискозитета с добавянето на страничен електролит при рН 6 и 8 се дължи на образуване на агрегати в разтворите, които водят до тяхното помътняване. Позицията на максимума зависи от типа на използвания електролит. Вискозните разтвори се характеризират с прагов стрес за протичане и еластичност, които също минават през максимум като функция на йонната сила. Тези системи с висока реология и натурален състав биха могли да се използват за получаване на натурални продукти за хигиена и козметика.

**Благодарност:** Тази работа е частично финансирана от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове, проект BG05M2OP001-1.002-0012 “Устойчиво оползотворяване на био-ресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти“.

### **Литература:**

1. K. Golemanov, S. Tcholakova, N. Denkov, E. Pelan, S. D. Stoyanov, *Soft Matter*, 2013, 9, 5738.
2. N. Pagureva, S. Tcholakova, K. Golemanov, N. Denkov, E. Pelan, S. D. Stoyanov. *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* 491 (2016) 18–28.

## ДИПОЛЕН ПОТЕНЦИАЛ НА ПРОСТИ ПОВЪРХНОСТИ

Боян Пейчев<sup>1</sup>, Иглика Димитрова<sup>2</sup>, Радомир Славчов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Queen Mary University of London, School of Engineering and Materials Science,  
Mile End Road, London E1 4NS, United Kingdom, b.peychev@qmul.ac.uk*

<sup>2</sup>*БАН, Институт по физикохимия „Академик Ростислав Каишев”,  
ул. „Акад. Г. Бончев”, бл. 11, 1113, София, България*

Потенциалите дефинирани на, до или през повърхността са от ключово значение за колоидната химия. Любопитно, определянето им се оказва по-трудно за по-простите системи. Експерименталните оценки на абсолютния диполен потенциал на простата фазовата граница вода/въздух варират с два порядъка и даже си сменят знака (от +50 mV до -100 mV) [1]. Зета потенциалът на същата повърхност е силно рН зависим [2]; същевременно, Волта потенциала на леко посолени електролитни разтвори не показва значима зависимост от рН-то [3].

Това са само някои от многобройните противоречиви експериментални резултати по темата. Теоретичните разглеждания са основно молекулна динамика, подкрепена с квантово-химична оптимизация на молекулите и също водят до противоречиви резултати.

Предлагаме, че правилното разбиране на механизма на зареждане на простите повърхности изисква внимателно разглеждане на всеки възможен принос по отделно, започвайки от най-универсалното взаимодействие – силите на изображение. Съответно, надграждайки класическия електростатичен подход, сме извели изрази за поляризирането на границата течност/вакуум вследствие ориентацията на диполите поради тези сили. С тяхната помощ ще покажем кога и защо се заражда самороден повърхностен диполен момент. Ще се опитаме да оценим неговата големина и съответстващия му диполен потенциал.

Цитати:

1. Parfenyuk, *Colloid Journal*, 2002, vol. 64(5), 588-595.
2. Cho, et al., *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2005, vol. 269,28-34.
3. Shapovalov, et al., *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2013, vol.15, 13991-13998.

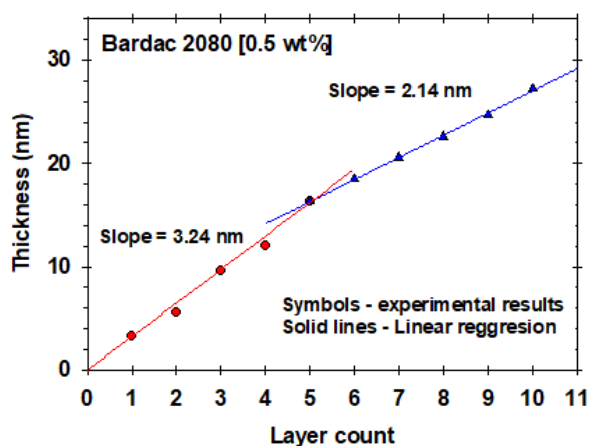
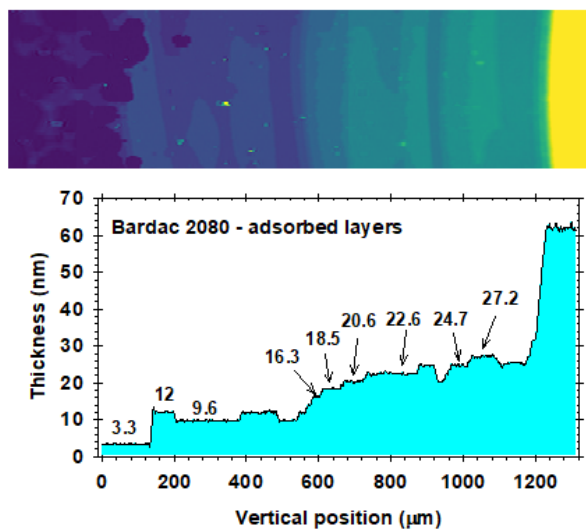
## АДСОРБЦИЯ НА КАТИОННИ ПОВЪРХНОСТНО АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА ВЪРХУ ТВЪРДА ПОВЪРХНОСТ

Борис Константинов<sup>1</sup>, Изида Златарева<sup>1</sup>, Силвия Симеонова<sup>2</sup>, Михаил Георгиев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> СУ „Св. Климент Охридски“, Катедра по Инженерна Химия и Фармацевтично Инженерство, [bkg@icre.uni-sofia.bg](mailto:bkg@icre.uni-sofia.bg) бул. „Джеймс Баучер“ 1 1164 София

<sup>2</sup> СУ „Св. Климент Охридски“, Катедра по Физикохимия, [fhss@chem.uni-sofia.bg](mailto:fhss@chem.uni-sofia.bg) бул. „Джеймс Баучер“ 1 1164 София

Обект на изследването е адсорбцията на катионни повърхностно активни вещества (ПАВ) върху молекулно гладка оксидна повърхност от SiO<sub>2</sub>. Формирането на адсорбционен слой от повърхностно активното вещество е следствие на баланс между електростатичното привличане между неговите молекули и агрегати и твърдата повърхност и хидрофобното привличане между мономерите. Изследваните от нас вещества (Bardac 2080, Bardac 2240, и Bardac LF) са смеси от диметил амониеви хлориди с различна дължина на въглеродородната опашка. Елипсометричните измервания показват, че тези вещества притежават свойството да се адсорбират на повърхността под формата на стратифициращи слоеве. При Bardac 2080 измерените дебелини са 2.1 и 3.2 nm за стъпало като броят на наблюдаваните стъпала е над 10. За Bardac LF наблюдаваме формиране на по-малък брой стъпала – от 2 до 5, докато за Bardac 2240 адсорбционният слой нараства постепенно като има само едно ясно обособено стъпало. След обилно изплакване на повърхността в чиста вода, тя остава оптически чиста. Независимите наблюдения с атомно силов микроскоп показват остатъци от адсорбираното ПАВ по повърхностите.



## **КИНЕТИКА НА АДСОРБЦИЯ НА ЛЕТЛИВИ АМФИФИЛНИ МОЛЕКУЛИ НА ГРАНИЦА ВОДА/ПАРИ И НИСКОМОЛЕКУЛНО ПАВ/ПАРИ**

Ралица Узунова, Румяна Станимирова, Красимир Данов, Теодор Гърков

*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 широк спектър от летливи амфибилни вещества, които притежават ниско парно налягане, ниска разтворимост във вода и добре изразена повърхностна активност. Те имат свойството да се адсорбират на границата вода/въздух и вода/масло, съответно да намаляват междуфазовото напрежение и да променят повърхностната реология. Летливите амфибилни вещества имат широко индустриално приложение и се използват като: ароматизатори в козметиката и модификатори на вискозитета на формулировките; съставки за мастилено-струен печат, био-сензорни и термо-сензорни електронни устройства и др.

Изследвана е кинетиката на адсорбция на използваните летливи амфибилни вещества върху водна капка, както и върху капка от нискомолекулно повърхностно активно вещество (SDS). Измерванията са извършени на апарат DSA 100R (Krüss GmbH, Germany). При адсорбцията от парите на летливите амфибилни молекули върху повърхността на водната капка се наблюдава понижаване на повърхностното напрежение с времето [1], което се обяснява с бариерно-дифузионен механизъм. Направено е и сравнение на адсорбция от пари на летливите амфибилни вещества върху изграден адсорбционен слой от SDS. Получените резултати отлично корелират с адсорбционните параметри, определени от изотермите на повърхностно напрежение на изследваните вещества.

Цитати:

[1] K.D. Danov, T.D. Gurkov, R.D. Stanimirova, R.I. Uzunova, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 2021, 625, 126931.

**Благодарности:** Тази научна работа е финансирана по КР– 06– Russia /3, 09. 12. 2020

## **ПЕНИ СТАБИЛИЗИРАНИ С ПОЛИВИНИЛ АЛКОХОЛИ**

Никола Генчев, Васил Георгиев, Златина Митринова, Славка Чолакова

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

Пените, стабилизирани с ниско-молекулни повърхностно-активни вещества (ПАВ), са сравнително добре изучени, като е показано, че пенливостта на разтворите на йонните ПАВ нараства линейно с повърхностното покритие, докато за нейонните ПАВ е необходимо достигането на повърхностно покритие от 90% за получаване на обемни пени. Теза разлика е обяснена с наличието на електростатично отблъскване при йонните ПАВ, което отсъства при нейонните [1,2].

Поливинил алкохолите са нейонни полимери, които намират широко приложение в различни индустрии за получаване на лакове, смоли, хирургически конци и материали за опаковане на храни. Пените, стабилизирани с полимери са от голям практически интерес, но поради по-големия си размер полимерните молекули се адсорбират по-бавно на повърхността от ниско-молекулните ПАВ и не винаги успяват да стабилизират мехурчетата диспергирани в тях.

Целта на настоящето изследване е да се изследват повърхностните и пенообразуващите свойства на серия от разтвори на поливинил алкохоли (PVA) с различна молекулна маса и степен на хидролиза. За получаване на пените използвахме четири пенни теста, които се различават по характерното време за пенообразуване. Проведените експерименти показаха, че по-високата степен на хидролиза на полимерните молекули води до по-ниска адсорбция и оттам до по-слаба пенливост. Получените резултати за пенливостта на полимерните разтвори в различните пенни тестове са представени като функция на повърхностното покритие, което е определено при характерното време за пенообразуване от проведените експерименти за измерване на динамичното повърхностно напрежение. Показано е, че резултатите за полимерните разтвори следват хода на универсалната зависимост, получена за нейонните ПАВ [1,2].

1. Petkova, B., Tcholakova, S., Chenkova, M., Golemanov, K., Denkov, N., Thorley, D., Stoyanov, S., Foamability of aqueous solutions: Role of surfactant type and concentration, Adv. Colloid Interface Sci. 276 (2020) 102084.

2. Petkova, B., Denkov, N., Tcholakova, S., Foamability of surfactant solutions: Interplay between adsorption and hydrodynamic conditions, Colloids Surf. A 626 (2021) 127009.

## **ЕФЕКТ НА СИЛИКОНОВ АНТИПЕНИТЕЛ ВЪРХУ ПЕНИ, ОБРАЗУВАНИ ОТ РАЗТВОРИ НА ПОЛИВИНИЛ АЛКОХОЛИ**

Васил Георгиев, Никола Генчев, Златина Митринова, Николай Денков,  
Славка Чолакова

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

Смесените антипенители се състоят от частици диспергирани в маслена фаза. В зависимост от начина си на действие те се разделят на: (1) бързи – разрушават пяната по време на нейното образуване и до 30 сек след спиране на пенообразуването; (2) бавни – не влияят върху пенообразуването, но намаляват стабилността на пените при престой над 5 мин; и (3) динамични – намаляват пенливостта, но не влияят върху стабилността на получената пяна [1]. Начинът на действие на антипенителите зависи не само от техния състав, но и от метода на пенообразуване и от типа и концентрацията на повърхностно-активното вещество, което се използва за стабилизиране на пените.

Целта на настоящето изследване е да се определи влиянието на смесен силиконово-силикатен антипенител върху получаването и стабилността на пени, получени по четири различни метода и стабилизирани със серия от поливинил алкохоли (PVA) с различна молекулна маса и степен на хидролиза, а също и с два референтни сурфактанта: нейонният Brij 35 (полиоксиетилен-23 додецил етер) и анионният SLES (натриев додецил етер сулфат с 1 етоксигрупа). Проведените експерименти показаха, че при използване на бърз метод за пенообразуване (Барч тест) и бавно адсорбиращи се нейонни сурфактанти, антипенителят действа като бърз и предотвратява захващането на въздух в пенителния разтвор, докато при използването на SLES се получава обемна пяна, която остава стабилна. Влиянието на антипенителя върху обема на получената пяна намалява при използване на тестове с по-дълго характерно време за пенообразуване и използването на бързо адсорбиращи се сурфактанти, което е обяснено с увеличаване на стабилността на псевдоемулсионните филми, които се образуват между антипенителните глобули и повърхността вода-въздух в пенните филми. Използването на полимерни молекули, които водят до образуването на по-дебели филми не повлиява съществено върху действието на антипенителните глобули, което показва, че силикатните частици имат достатъчна дълбочина на проникване във водната фаза, за да дестабилизируют пенните филми.

1. Mechanistic Understanding of the Modes of Action of Foam Control Agents. N.D. Denkov, K.G. Marinova, S.S. Tcholakova. Adv. Colloid Interface Sci. 206 (2014) 57-67.

## **ПЕНЛИВОСТ НА РАЗТВОРИ СЪДЪРЖАЩИ ГЛИЦЕРОЛ**

Кръстина Стефанова, Васил Георгиев, Златина Митринова, Славка Чолакова

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

Глицеролът е компонент, който традиционно се добавя в различни козметични формулировки, за да промени усещането за мекота при тяхното приложение. Добавянето на глицерол към разтворите на повърхностно-активни вещества (ПАВ) влияе както върху вискозитета на непрекъсваната среда, така и върху адсорбиращата способност на ПАВ, което от своя страна може да промени техните пенообразуващи и пеностабилизиращи свойства. Целите на настоящето изследване са да се определи влиянието на глицерол върху (1) Разтворимостта на ПАВ; (2) Критичната концентрация за мицелообразуване; (3) Площта на молекула в адсорбционния слой; (4) Кинетиката на адсорбция; (5) Пенообразуващата и пеностабилизираща способност; (6) Антипенителната активност на смесен силиконово-силикатен антипенител. За постигане на поставените цели проведехме експерименти с два нейонни сърфактанта Brij 35 (полиоксиетилен-23 додецил етер) и Brij 58 (полиоксиетилен-20 хексадецил етер), два анионни сърфактанта SDS (натриев додецил сулфат) и SLES (натриев додецил етер сулфат с 1 етоксидна група), и два катионни ДТАВ (додецил триметил амониев бромид) и СТАВ (цетил триметил амониев бромид). Получените резултати, показаха че добавянето на глицерол за всички изследвани сърфактанти води до нарастване на критичната концентрация на мицелообразуване, нарастване на площта на молекула в адсорбционния слой, намаляване на скоростта на адсорбция, в резултат на което пенливостта намалява, а антипенителната активност се увеличава.

Резултатите за пенливостта в присъствие на глицерол като функция на повърхностното покритие в динамичните адсорбционни слоеве бяха сравнени с резултатите, представени в работите на Petkova et al. [1,2] получени в отсъствие на глицерол в пенителните разтвори. Сравнението показва, че универсалните зависимости показани в [1,2] остават в сила и за пени, получени в присъствие на глицерол.

1. Petkova, B., Tcholakova, S., Chenkova, M., Golemanov, K., Denkov, N., Thorley, D., Stoyanov, S., Foamability of aqueous solutions: Role of surfactant type and concentration, Adv. Colloid Interface Sci. 276 (2020) 102084.
2. Petkova, B., Denkov, Tcholakova, S., Foamability of surfactant solutions: Interplay between adsorption and hydrodynamic conditions, Colloids Surf. A 626 (2021) 127009.

## **ПРИГОТВЯНЕ НА ЛИПОЗОМИ ПРЕДНАЗНАЧЕНИ ЗА ОФТАЛМОЛОГИЧНО ЛЕКАРСТВЕНО ДОСТАВЯНЕ**

Росена Крушовалиева, Христо Цачев

Стремежът към постигане на по-добри терапевтични резултати за пациентите, насочва труда на изследователите към подобряване на съществуващите и създаването на нови лекарство доставящи системи. Обнадеждаващи са резултатите, описани в научната литература по отношение на употребата на липозомите като средство за офталмологично лекарство въвеждане. Липозомите са биосъвместими, нетоксични нано структурни системи, чрез които се избягва дразненето на очната повърхност и се постига по-силен организмов отговор към въведеното лекарство вещество, при употребата на по-малко количество от него. Един от най-важните фактори, определящ успеха на липозомната терапевтична система е набора от компоненти, изграждащи я. Всеки един от тях ѝ придава различни свойства. Липозомите, които се аплицират върху очната повърхност трябва да притежават достатъчна „твърдост“ на липозомната стена, за да задържат натовареното в тях лекарство, но и да бъдат достатъчно пластични, за да преодолеят офталмологичните бариери и да достигнат до таргетните структури. Специално място в това отношение заемат холестеролът и олеиновата киселина. Докато стабилността на системата би била немислима без употребата на холестерол, олеиновата киселина, като част от липидите, естествено присъстващи в слъзния филм, осигурява поносимост и улеснява пенетрацията на активните молекули в очните тъкани. Тези две вещества оказват влияние и върху други липозомни характеристики, като физико-химични свойства, ефективност на натоварване с лекарствени вещества и стабилност на системата.

Цитати:

1. José Javier López-Cano et.al – Liposomes as vehicles for topical ophthalmic drug delivery and ocular surface protection – Expert Opinion on drug delivery, 2021, 79:1-23.
2. Maria-Lucia Briuglia & Chiara Rotella & Amber McFarlane & Dimitrios A. Lamprou Influence of cholesterol on liposome stability and on in vitro drug release, Drug Deliv. and Transl. Res., 2015, 1:1-11.
3. Michael Anderson and Abdelwahab Omri - The Effect of Different Lipid Components on the In Vitro Stability and Release Kinetics of Liposome Formulations, Drug Delivery, 2004 39:11-33.
4. Masahiro Yamauchi, Kyoko Tsutsumi, Masayuki Abe, Yoichi Uosaki, Masashi Nakakura, and Noboru Aoki - Release of drugs from liposomes varies with particle Size, - Biol. Pharm. Bull., 2007, 35: 963-966.
5. Xiang-Chun Gao<sup>1</sup>, Hui-Ping Qi, Jian-Hai Bai, Lei Huang and Hao Cui - Effects of oleic acid on the corneal permeability of compounds and evaluation of its ocular irritation of rabbit eyes, Current eye research, early online, 2014, 1-8.



## **ПРИГОТВЯНЕ НА АМОРФНИ ТВЪРДИ ДИСПЕРСИИ НА ГЛИБЕНКЛАМИД И РАЗТВАРЯНЕ В БИОПОДОБНА СРЕДА**

Владимир Петков, Захари Винаров, Славка Чолакова

*Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски”,  
Катедра „Инженерна Химия и Фармацевтично Инженерство”,  
1164 София, бул. Джеймс Баучър 1, [vdp@lcpe.uni-sofia.bg](mailto:vdp@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.

Целта на настоящето изследване е да се установи как вида на метода използван за получаване на аморфни твърди дисперсии влияе върху освобождаването на активното вещество глибенкламид. Използвани бяха различни полимери: хидроксипропил целулоза (HPC) с различна молекулна маса (SSL – 40 kDa, L – 140 kDa, H 1000 kDa), хидроксипропилметил целулоза ацетат сукцинат (HPMCAS) и Poloxamer 407. За получаване на твърдите дисперсии беше използван ротационен вакуум изпарител и разпръсквателно сушене, а твърдото им състояние беше анализирано чрез диференциална сканираща калориметрия и рентгеново разсейване. Разтварянето на глибенкламид беше проследено в рамките на 120 мин. в *in vitro* модел, наподобяващ условията в човешкия стомашно-чревен тракт.

При системите приготвени на ротационен изпарител, всички изследвани полимери (с изключение на Poloxamer 407) подобряват разтварянето на лекарството. Измерени са концентрации много над равновесната разтворимост на кристален глибенкламид (2.56 µg/mL), като най-добър ефект е постигнат за системата с HPC-SSL (147 µg/mL). Съществен недостатък на тези формулировки, е че образуваните преситени разтвори са нестабилни и се утаяват след около 60-90 мин, в зависимост от полимера. За разлика от това, при системите приготвени чрез разпръсквателно сушене се достигат още по-високи концентрации на разтворен глибенкламид, които са стабилни в рамките на 120 мин. В този случай, най-добър добро разтваряне беше измерено за аморфната форма приготвена с HPC-SSL (203 µg/mL).

В заключение, включването на глибенкламид в аморфни твърди дисперсии значително подобрява разтварянето му, като системите получени чрез разпръсквателно сушене се характеризират със значително по-добро разтваряне и стабилност на преситените разтвори, в сравнение с тези приготвени на ротационен вакуум изпарител.

*Благодарности: част от изследванията са проведени на апаратура, закупена 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 АКТИВНИ ЛЕКАРСТВЕНИ ВЕЩЕСТВА 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@lcp.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. 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 активни вещества (АВ) терапията е по-ефикасна, в сравнение с по-хидрофилните АВ.

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 избран набор от АВ, 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.

Чрез разработената методика беше определено, че екстракцията на АВ в маслените капки на емулсията е основния действащ механизъм определящ ефекта от терапията. Ключова роля има заряда на молекулата и афинитета ѝ към маслената фаза (соево масло) при физиологично рН. Беше определена критична стойност на разпределение кръвна плазма–липидни капки  $\text{Log}K_{\text{eff}} = 1$ , която успешно разграничава положителните от отрицателните контроли. Описания подход може да се използва в клиничната практика за изследване на АВ, за които не е известен специфичен антидот, което ще доведе до по-широк набор от средства при лечението на остри интоксикации в спешната медицина.

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

**СЕКЦИЯ ОРГАНИЧНА ХИМИЯ**

**Любен Бориславов, ФХФ - СУ**

**Михаил Коларски, ФХФ - СУ**

**Михаела Стоянова, ХФ - ПУ**

**Елица Петкова, ХФ - ПУ**

**Параскева Терзийска, ХФ - ПУ**

**Ивелина Койчева, ХФ - ПУ**

**Ивелина Маджарова, ФХФ - СУ**

**Юлиан Романов, ФХФ - СУ**

**Николай Лазаров, ФХФ - СУ**

**Савина Стоянова, ФХФ - СУ**

**Стефан Караджов, ХФ - ПУ**

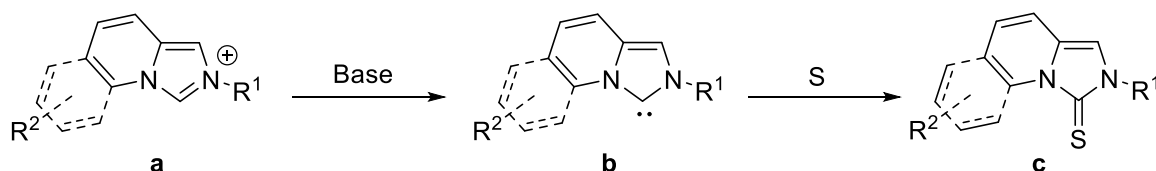
## ПОЛУЧАВАНЕ НА ТИОНИ, ПРОИЗВОДНИ НА ИМИДАЗОХИНОЛИН- И ИМИДАЗОПИРИДИНИЛИДЕНИ

Любен Бориславов<sup>1</sup>, Р. Ляпчев<sup>1</sup>, И. Маджарова<sup>1</sup>, Д. Еленкова<sup>1</sup>, М. Цветков<sup>1</sup>,  
Н. Петкова-Янкова<sup>1</sup>, А. Колева<sup>1</sup>, П. Петров<sup>1</sup>

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

При депротониране на карбенов прекурсор (**a**), в случая имидазолиева сол, се генерира N-хетероциклен карбен (**b**). N-хетероциклените карбени (NHC) са клас стабилни синглетни карбени, намиращи приложение в органичния катализ - като лиганди, координиращи към преходен метал или в свободна форма - като органокатализатори. Каталитичната активност на съответните катализатори (комплекси или свободни карбени) до голяма степен се определя от електронните свойства на хетероциклената карбенова система. Поради тази причина изследването на електронните свойства на N-хетероциклените карбени е важно за дизайна на ефективни катализатори.

Свободните NHC могат да взаимодействат с халкогенни елементи, при което се получават адукти от типа NHC=E (E ≡ O, S, Se):



Серните адукти (**c**) на N-хетероциклените демонстрират флуоресцентни свойства. Следователно емисионните спектри на тези адукти могат да бъдат използвани за оценка на електронните особености на съответните карбени.

В настоящия доклад представяме получаването на серия от имидазолиевии соли и съответните им имидазохинолин- и имидазопиридилидени тиони. Получените съединения бяха изследвани чрез абсорбционна и флуоресцентна спектроскопия.

Авторите изказват благодарност на проект № 2922 НИС при СУ (КП-06-М59/6 от 19.11.2021 г.), както и на университетски проект 80-10-63 от 10.05.2022 г.

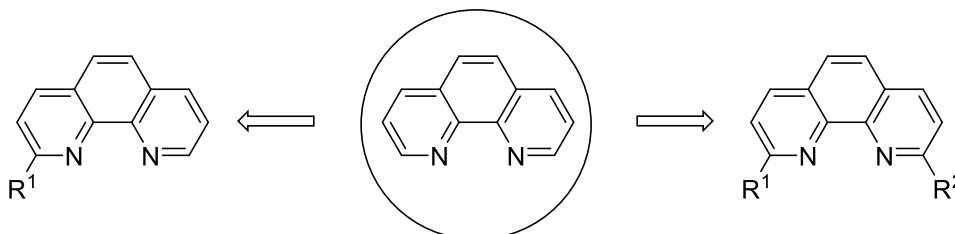
## СИНТЕЗ И ИЗСЛЕДВАНЕ НА НОВИ 1,10-ФЕНАНТРОЛИНОВИ ПРОИЗВОДНИ

Михаил Коларски<sup>1</sup>, Р. Ляпчев<sup>1</sup>, Й. Захариева<sup>1</sup>

<sup>1</sup>СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“ 1, 1164 София, България, michaelkolarski@gmail.com

Фенантролинови, кумаринови, бипиридилови и други хетероциклени системи, са широко използвани лиганди, способни да координират към преходни метали и точно *d*- и *f*-елементи.

Чрез вариране на заместителите във фенантролиновата система, могат да бъдат настройвани свойствата на съответните им комплекси. По тази причина е важно да бъдат разработени лесни и достъпни процедури за въвеждане на заместители в хетероциклената система. В научната литература са описани различни методи за получаване на монозаместени във втора позиция и симетрични дизаместени във втора и девета позиция фенантролинови структури. Липсват обаче процедури за получаване на несиметрично дизаместени фенантролини, използващи меки условия и достъпни стабилни реагенти.



В настоящия доклад ще представим нашите изследвания, целящи разработването на подход за получаване на несиметрично дизаместени 1,10-фенантролинови производни. Подходът използва реакции, катализирани от палადиеви съединения, и позволява използване на непретенциозни условия и въвеждането на голямо разнообразие от заместители във втора и девета позиция.

Авторите изказват благодарност на проект № 2922 НИС при СУ (ФНИ-КП-06-М59/6 от 19.11.2021г.) и на проект № КР-06-Н39/1 от 09.12.2019, финансиран от Фонд научни изследвания, както и на университетски проект 80-10-63 от 10.05.2022 г.

## СИНТЕЗ, СТРУКТУРНО И СПЕКТРАЛНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА НОВО ХЕМИЦИАНИНОВО БАГРИЛО

Михаела Стоянова<sup>1</sup>, Румяна Бакалска<sup>2</sup>, Мина Тодорова<sup>3</sup>, Цонко Колев<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
ул. „Цар Асен“24, Пловдив 4000, [stoyanovamihaela99@gmail.com](mailto:stoyanovamihaela99@gmail.com)

<sup>2</sup> Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет, катедра  
Органична химия, ул. „Цар Асен“24, Пловдив 4000, [bakalska@uni-plovdiv.bg](mailto:bakalska@uni-plovdiv.bg)

<sup>3</sup> Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет, катедра  
Органична химия, ул. „Цар Асен“24, Пловдив 4000, [mmtodorova@abv.bg](mailto:mmtodorova@abv.bg)

<sup>4</sup> Институт по молекулярна биология "Акад. Румен Цанев", ул. Акад. Г. Бончев, бл. 21,  
София 1113, [tskolev@bio21.bas.bg](mailto:tskolev@bio21.bas.bg)

Синтезирано е ново хемицианиново багрило (*E*)-4-[4-(диметиламино)стирил]-1-бутилхинолиниев йодид и е характеризирано чрез монокристална рентгенова дифракция, <sup>1</sup>H- и <sup>13</sup>C ЯМР, УВ-видима, ИЧ-спектроскопия. Съединението кристализира в триклинна система, пространствена група *P*-1. Параметрите на клетката са  $a = 7.419(11) \text{ \AA}$ ,  $b = 9.132(4) \text{ \AA}$ ,  $c = 15.611(6) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 81.859(18)^\circ$ ,  $\beta = 84.61(5)^\circ$ ,  $\gamma = 84.43(5)^\circ$ . Рентгено-структурните данни показват, че елементарната клетка съдържа два катиона и два йодидни аниона. Катионите се разполагат успоредно на принципа глава – опашка, с приплъзване, поддържани от слаби междумолекулни взаимодействия. При двата ароматни фрагмента от молекулата се наблюдава усукване спрямо равнината на мостовата двойна връзка – бензеновото ядро на  $8.84^\circ$ , а хинолиниевото на  $-1.34^\circ$ . Направена е връзка между структурата на съединението и оптичната нелинейност, като е оценена планарността на молекулата и е изчислен структурният параметър BLA (bond length alternation).

Изследвани са УВ-видимите спектри на багрилото в 11 разтворители с различна протонодонорна и протоноакцепторна способност. За да се прецени относителната стабилност на основното и възбудено електронно състояние на багрилото, са потърсени корелации с различни емпирични параметри, описващи полярността на разтворителите. Въз основа на проведените изследвания, е направена сравнителна оценка на степента на пренос на заряда, като за сравнение са използвани характеристиките на по-рано публикувани „двуядрени“ багрила [1, 2].

I. Georgiev, *Inorg. Chem.*, 2020, vol. 15, 245-250 R. Bakalska, M. Todorova, H. Sbirikova, B. Shivachev, T. Kolev, *Dyes and Pigments* 136 (2017) 919-929. 2) M. Todorova, R. Bakalska, Ts. Kolev, *Spectrochim. Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 108 (2013) 211-222.

## СИНТЕЗ, СПЕКТРАЛНО И СТРУКТУРНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА НОВО МЕРОЦИАНИНОВО БАГРИЛО

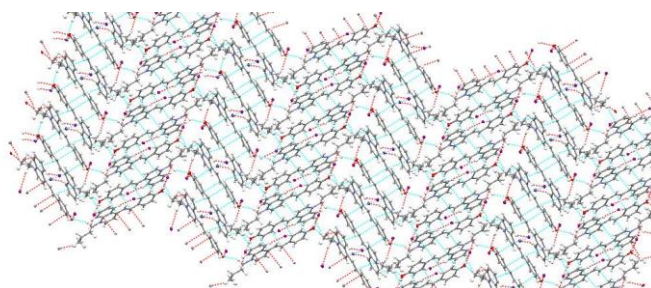
Елица Петкова<sup>1</sup>, Мина Тодорова<sup>2</sup>, Румяна Бакалска<sup>2</sup>, Цонко Колев<sup>3</sup>

<sup>1</sup> студент, IV курс, спец. Медицинска химия, Пловдивски университет „Паусий Хилендарски, Химически факултет, ул. „Цар Асен”24, Пловдив 4000, [elitsa.petkova@abv.bg](mailto:elitsa.petkova@abv.bg)

<sup>2</sup> Пловдивски университет „Паусий Хилендарски, Химически факултет, катедра Органична химия, ул. „Цар Асен”24, Пловдив 4000, [minatodorova@uni-plovdiv.bg](mailto:minatodorova@uni-plovdiv.bg), [bakalska@uni-plovdiv.bg](mailto:bakalska@uni-plovdiv.bg)

<sup>3</sup> Институт по молекулярна биология "Акад. Румен Цанев", ул. Акад. Г. Бончев, бл. 21, София 1113, [tskolev@bio21.bas.bg](mailto:tskolev@bio21.bas.bg)

Получено е ново мероцианиново багрило (*E*)-4-(4-хидроксистирил)-1-бутилхинолиниев йодид чрез кондензация на Кнъовенагел. Отгледани са монокристали. Багрилото кристализира в моноклинната система с параметри на клетката  $a = 10.4471(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 9.0957(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 20.3478(7) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90.00^\circ$ ,  $\beta = 108.343(3)^\circ$ ,  $\gamma = 90.00^\circ$ , а пространствената група е  $P2_1/c$ . Молекулите образуват зигзагообразни вериги, фиг. 1.



Фигура 1. Зигзагообразно подреждане на багрилните молекули

Оценени са структурни параметри – планарност и VLA, свързани с оптичната нелинейност. Наблюдава се, че бензеновото ядро лежи в равнината на мостовата двойна връзка, а хинолиниевото е усукано на ъгъл от  $-3.02^\circ$ . Катионът е практически равнинен, което благоприятства ефективната делокализация на  $\pi$ -електроните, а оттам се улеснява поляризацията им от донорната към акцепторната част на молекулата. Изчислена е стойността на параметъра VLA, която е свързана със степента на поляризация на молекулата.

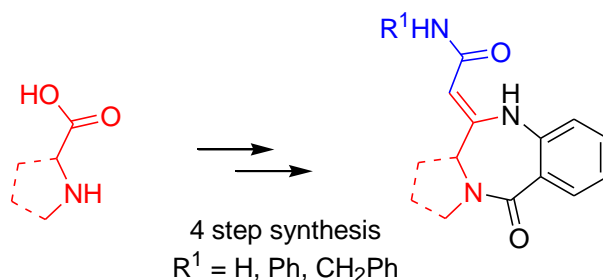
В ИЧ спектър на съединението се наблюдават твърдофазни ефекти като Evan's holes (Евансови дупки) и Davydov splitting (Давидово разцепване) на ивиците, характерни за солеобразните съединения.

## СИНТЕЗ НА НОВИ СТРУКТУРНИ АНАЛОЗИ НА ФУЛИГОКАНДИН А

Параскева Терзийска, Пламен Ангелов

*Катедра Органична химия, Химически факултет на ПУ „Паисий Хилендарски“, 4000  
Пловдив, ул. “Цар Асен” 24, terziyska9@gmail.com, angelov@uni-plovdiv.bg*

Проведени са изследвания върху нов подход за синтез на природното съединение Фулигокандин А и негови структурни аналози. В четириетапен синтез успешно е конструиран бензодиазепиновия пръстен на природното съединение чрез приложение на бета-енаминоамиди като синтетични еквиваленти на енолатни синтони. Получени са четири нови бензодиазепинови енамина, чиято структура наподобява тази на фулигокандиновите алкалоиди. Извършените моделни експерименти с аминокиселините саркозин и пролин осигуряват добра отправна позиция за продължаване на изследванията с разширен набор от аминокиселини и за получаване на нови потенциално биологично активни вещества.



*Изследванията са проведени с финансовата подкрепа на Фонд „Научни изследвания“ – проект КП-06-Н59/14*



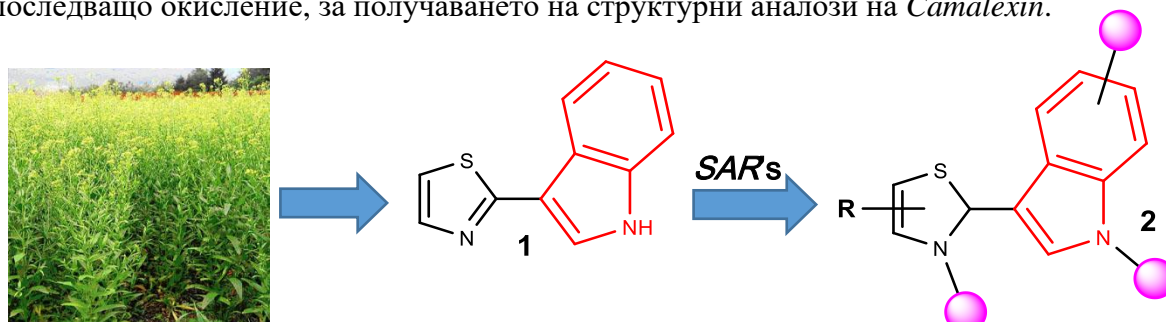
## НОВ МЕТОД ЗА СИНТЕЗ НА БЛИЗКИ СТРУКТУРНИ АНАЛОЗИ НА ФИТОАЛЕКСИНА *CAMALEXIN*

Ив. Койчева<sup>1</sup>, Й. Стремски, Ст. Статкова-Абегхе, Д. Киркова, Пл. Ангелов, Ил. Иванов

<sup>1</sup>Пловдивски университет „Паисий Хилендарски, Химически факултет,  
ул. „Цар Асен”24, Пловдив 4000, ivelina.koycheva@mail.bg

Скорошно научно изследване мотивира приложението на индоловия фитоалексин *Camalexin* **1** като химиотерапевтично средство при лечение на рак на гърдата<sup>1</sup>. В допълнение на това, негови близки аналози (**2**, **Схема 1**) се открояват със своята забележителна антивирусна, анти-фитопатогенна и фунгицидна активност<sup>2,3</sup>.

В тази връзка бе определена и целта на настоящото изследване, а именно приложение на нов двуетапен синтетичен метод, съчетаващ реакция на амидоалкилиране и последващо окисление, за получаването на структурни аналози на *Camalexin*.



*Camelina sativa* **Схема 1.** *Camalexin* и негови структурни аналози

За осъществяване на целта е изследвана реакция на  $\alpha$ -амидоалкилиране на метокси и халоген съдържащи индоли с *N*-ацилиминиеви реагенти, получени от метил тиазоли с хлороформиати. Установено е, че реакциите протичат успешно в  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  за време от 10 до 90 минути при  $-4$ – $25^\circ\text{C}$ , в присъствие на  $\text{Et}_3\text{N}$ , с получаването на 14 *N*-ацилирани продукти с високи добиви от 86% до 98%. В следващия етап, те са успешно реароматизирани, чрез окисление с еквивалентно количество *o*-Chloranil или DDQ в  $\text{CH}_3\text{CN}$  за време от 10 до 30 минути при стайна температура, до получаването на 10 аналози на *Camalexin* с 68%–98% добив. Всички новосинтезирани съединения са пречистени с препаративна колонна хроматография на неутрален алуминиев оксид, спектрално анализирани и структурно доказани чрез  $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ -ЯМР и ИЧ спектри.

**Благодарности:** Изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на национален фонд „Научни изследвания” към МОН, договор КП-06-М59/5.

### Цитати:

1. N. Yamashita, C. Taga, M. Ozawa, Y. Kanno, N. Sanada, R. Kizu, *J. Nat. Med.*, 76, **2022**, 110.
2. A. Liao, L. Li, T. Wang, A. Lu, Z. Wang, Q. Wang, *J. Agric. Food Chem.*, 70, **2022**, 2554.
3. M. Pedras, A. Abdoli, *Bioorg. Med. Chem.*, 26, **2018**, 4

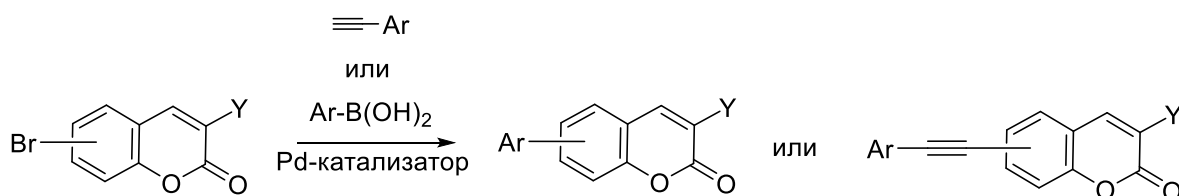
## ФУНКЦИОНАЛИЗИРАНЕ НА КУМАРИНОВИ СИСТЕМИ ЧРЕЗ РЕАКЦИИ НА СУЗУКИ И СОНОГАШИРА

Ивелина Маджарова, Р. Ляпчев, А. Колева, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,  
Катедра Органична химия и фармакогнозия, e-mail: ivelinamadjarova99@gmail.com

Пирановата структура е основна структурна единица в съединения с богато разнообразие както на представители, така и на фармакологични свойства. Към тази група се отнасят кумарините, 3,4-дихидрокумарините, флаваноидите, бискумарините и техни производни, открити в много лечебни растения. Тези вещества имат голямо значение за функциите на отделните растителни части и се синтезират и освобождават от тях като вторични метаболити. Синтетичните им аналози не отстъпват по брой, биологични свойства и полифункционалност в структурата си.

Представените резултати са свързани с функционализиране и получаване на нови кумаринови структури с потенциална биологична активност като сме използвали реакции на Сузуки и Соногашира.



Авторите изказват благодарност на проект № 2922 НИС при СУ (ФНИ-КП-06-М59/6 от 19.11.2021 г.) и проект № 80-10-35 от 10.05.2022 към СУ „Климент Охридски“.

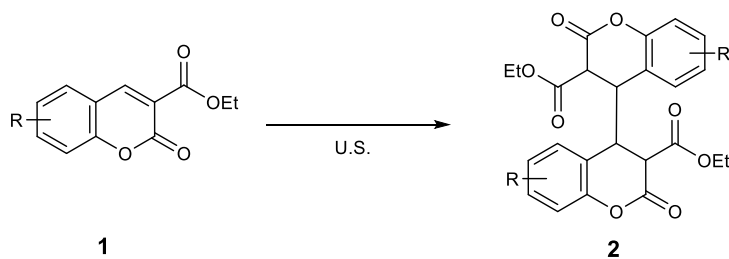
## ВЛИЯНИЕ НА ЗАМЕСТИТЕЛИТЕ В КУМАРИНОВИЯ ПРЪСТЕН В РЕАКЦИИ НА ДИМЕРИЗАЦИЯ НА ЕТИЛОВИЯ ЕСТЕР НА КУМАРИН-3-КАРБОКСИЛНАТА КИСЕЛИНА

Юлиян Романов, А. Колева, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,  
Катедра Органична химия и фармакогнозия, e-mail: dimitrov\_yuliyana@abv.bg

През последните години интерес представляват голям брой природни и синтетични бискумаринови производни във връзка с участието им в редица биохимични процеси и за разработване на ефективни противотуморни препарати. Като пример може да се посочи инхибиращото действие на някои представители от тази група спрямо редица ензими като кинази, теломерази, уреази, интегрази, ДНК-полимерази, 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/хидриране. Недостатъците на изброените методи са дългото реакционно време, незадоволителните добиви или сложната апаратура необходима за осъществяване на взаимодействието.



Ние си поставихме за цел да намерим синтетичен подход за получаване на бискумаринови системи като за изходно съединение се използва етиловия естер на кумарин-3-карбоксилната киселина и негови заместени производни.

Авторите изказват благодарности на договор № 2877 НИС при СУ, КП-06-Н39/15 от 17.12.2019г. и договор № 80-10-28 от 10.05.2022 към СУ „Климент Охридски“.

## **НОВА ДЕФИНИЦИЯ И ОБОГАТЯВАНЕ НА НАБОР ОТ КОНСТАНТИ ЗА ПРЕДВИЖДАНЕ НА ПЛЪТНОСТИ НА ЙОННИ ТЕЧНОСТИ ЧРЕЗ МЕТОДА НА ОСТАТЪЧНИЯ ОБЕМ**

Николай Лазаров, Савина Стоянова, Милен Г. Богданов\*

*Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Кл. Охридски”,  
Бул. “Джеймс Баучер” 1, София 1164*

*\*Автор за кореспонденция. E-mail: mbogdanov@chem.uni-sofia.bg*

Методът на Остатъчния Обем (The Residual Volume Approach, RVA) е емпиричен модел за предвиждане на физико-химичните свойства на Йонни Течности (ЙТ), използващ проста линейна корелация между даденото свойство и остатъчния обем на заместителите в дадена група ЙТ. [1] Методът е приложен успешно за предвиждане на плътност, вискозитет, йонна проводимост и топлинен капацитет на голям брой ЙТ от различен вид [1-3] с използването на първоначално изведени константи ( $\beta^X$ ) за 12 алкилови заместители с неразклонена верига ( $C_1$  до  $C_{12}$ ) [1].

В настоящото изследване ние предлагаме нов набор от 45 константи, включващ разклонени и функционализирани заместители. Също така, предлагаме и механизъм за допълване на съществуващият набор от константи, при появата на нови теоретични или експериментални данни. Приложимостта и ефективността на метода с новедефинираните константи на заместителите  $\beta^X$  бе тествана на базата на 447 плътности (182 йонни течности измерени при 293-363 K). Резултатите показват отлична способност за предвиждане със средното абсолютно сравнително отклонение (%AARD) е 0.18%. Доказана е и способността на Метода на Остатъчния Обем да предвижда плътности на йонни течности с различна катион-анион двойка, както и възможността за разширяване и подобряване на други методи за предвиждане на физико-химични свойства.

### Библиография:

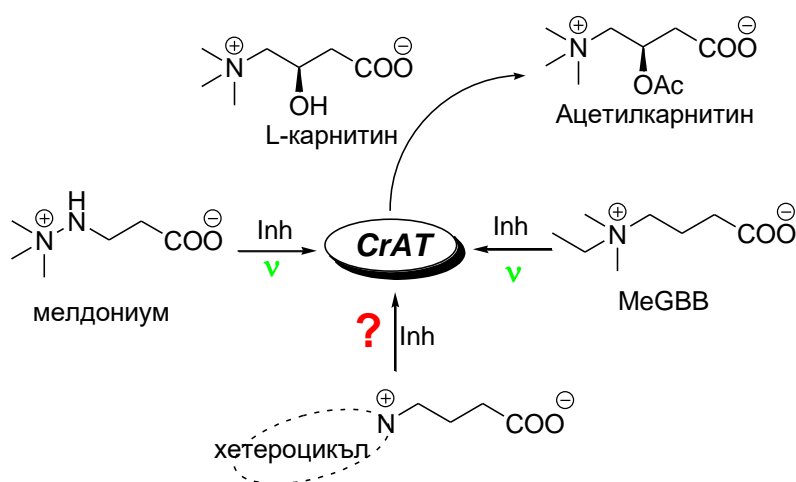
1. Bogdanov & Kantlehner, Z. Naturforsch. 64B (2009) 215-222
2. Bogdanov et al., Z. Naturforsch. 64B (2009) 756-764
3. Bogdanov et al., Z. Naturforsch. 65B (2010) 37-48

## ХЕТЕРОЦИКЛЕНИ ГАМА-БУТИРОБЕТАИНИ КАТО ПОТЕНЦИАЛНИ МЕТАБОЛИТНИ МОДУЛАТОРИ

Савина Стоянова, Милен Г. Богданов\*

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,  
бул. Джеймс Баучер №1, \*e-mail: mbogdanov@chem.uni-sofia.bg

Синтезирани и охарактеризирани са десет хетероцикленни аналози на гама-бутиробетамин (GBB) като потенциални модулатори на бета-окислението на мастни киселини в организма чрез инхибиране на карнитин ацетилтрансфераза (CrAT).



Инхибиращата способност на получените вещества е оценена посредством *in vitro* изследвания и сравнена с тази на положителните контроли мелдонииум (одобрено лекарство за третиране на ИБС, под търговското наименование Mildronate®) и MeGBB (препарат в III-та фаза на клинично проучване). Всички изследвани съединения демонстрират инхибираща способност в ниската милимолярна област ( $IC_{50} = 2,24-43,6$  mM), като някои от тях са по-активни от положителните стандарти.

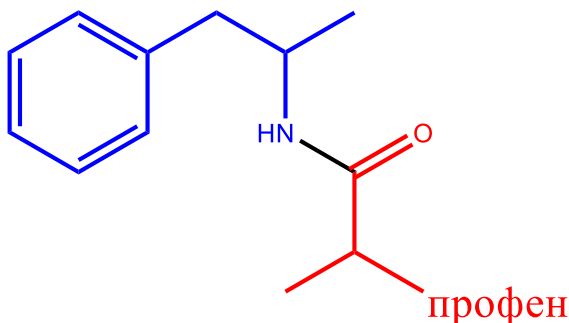
Определените  $IC_{50}$  стойности за всички съединения позволиха извеждането на допълнителни изводи по отношение на връзката структура-активност. За най-активния представител от изследваната група, 4-(изохинолин-2-ил) бутаноат бяха проведени кинетични изследвания с цел определяне механизма на инхибиране. Резултатите показаха, че съединението е обратим конкурентен инхибитор на CrAT с  $K_i = 3,5$  mM, което е сравнимо с инхибиращата способност на лекарствения препарат милдронат ( $K_i = 1,63$  mM) и показва възможността да бъде прилагано като агент за контролиране на метаболитните процеси в човешкия организъм и потенциал за лечение на исхемична болест, диабет и някои видове рак.

## **СИНТЕЗ НА НОВИ БИОФУНКЦИОНАЛНИ АМФЕТАМИНОВИ ПРОИЗВОДНИ И ИЗСЛЕДВАНЕ НА ТЯХНАТА *IN VITRO* БИОЛОГИЧНА АКТИВНОСТ**

Стефан Караджов, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов

*Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24,  
stefan\_ak@abv.bg*

Амфетамин или  $\alpha$ -метил-фенилетиламин е психоактивно вещество, което стимулира централната нервна система. Той създава усещане за бодрост, сила и лекота, дори и при хора в състояние на силно физическо изтощение. Съединението и неговите производни се използват при лечението на депресивни психози. Нестероидни противовъзпалителни средства (НСПВС), са лекарствени средства с различен химичен строеж с периферен аналгетичен, антипиретичен и противовъзпалителен ефект. В тази връзка интерес представлява получаването на хибриди обединяващи скелета на амфетамин с различни профенови молекули (ибупрофен, кетопрофен, флурбипрофен, напроксен и карпрофен)



Фигура 1. Обща структурна формула на новите амфетаминови хибриди.

На ново синтезираните биофункционални амфетаминови производни е направена *in vitro* антиоксидантна активност, инхибиране денатурацията на албумин (IAD) и антитриптична активност (АТА). Амфетаминовите производни показват много добра *in vitro* биологична активност.

### **БЛАГОДАРНОСТИ**

*Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ към МОН, договор КП-06-М29*

**СЕКЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧНА ХИМИЯ**

**Надежда Батаклиева, ХФ - ТУ**

**Дияна Димитрова, ХФ - ТУ**

**Ивет Иванова, ХФ - ТУ**

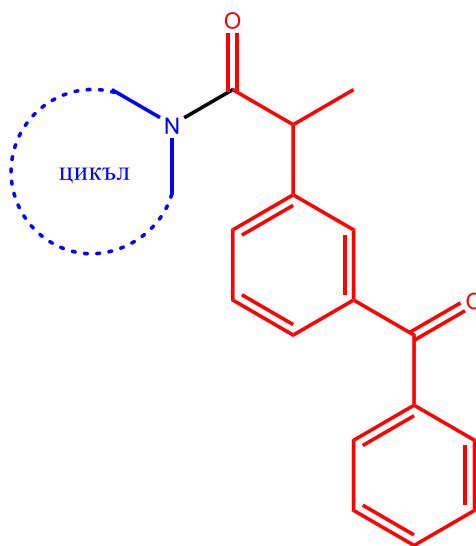
## **СИНТЕЗ НА НОВИ БИОФУНКЦИОНАЛНИ КЕТОПРОФЕНОВИ ПРОИЗВОДНИ С РАЗЛИЧНИ N-СЪДЪРЖАЩИ ХЕТЕРОЦИКЛИ И ОПРЕДЕЛЯНЕ НА ТЯХНАТА АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНОСТ**

Надежда Батаклиева, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов

*Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24,  
nadenceto099@gmail.com*

Кетопрофенът е нестероидно противовъзпалително средство (НСПВС) притежаващо аналгетични и антипиретични свойства. От друга страна N-съдържащите хетеропръстени участват в състава на много природни и синтетични препарати широко използвани в медицинската практика.

В тази връзка успешно са получени 4 нови биофункционални хибридни молекули на кетопрофен с различни N-съдържащи хетеропръстени (пирролидин, пиперидин, 1,2,3,4-тетрахидрохиолин и 1,2,3,4-тетрахидроизохиолин)



Фигура 1. Обща структурна формула на кетопрофеновите хибриди.

Изследвана е антиоксидантна активност на новосинтезираните биофункционални кетопрофенови производни.

### **БЛАГОДАРНОСТИ**

*Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ към МОН, договор КП-06-M29/1.*

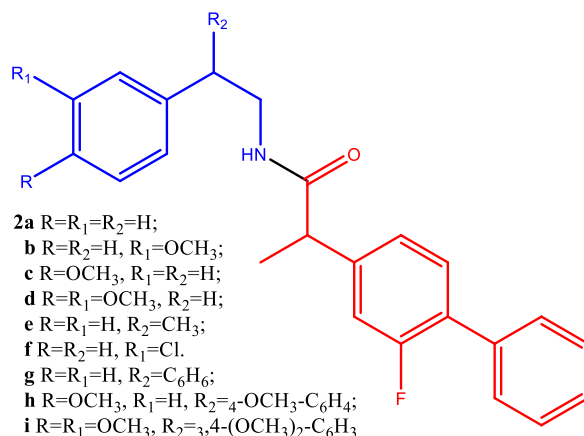


## ИЗСЛЕДВАНЕ *IN VITRO* БИОЛОГИЧНАТА АКТИВНОСТ НА НОВИ БИОФУНКЦИОНАЛНИ ХИБРИДИ НА ФЛУРБИПРОФЕН

Дияна Димитрова, Димитър Божилов, Илиян Иванов, Станимир Манолов

Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
кафедра Органична химия, ул. Цар Асен 24,  
diana\_dimitrova7@abv.bg

Флурбипрофенът е широко разпространено нестероидно противовъзпалително средство, което притежава аналгетичен и антипиретичен ефект. Производните на 2-фенилетиламин са от изключително значение за синтеза на изохинолиновите алкалоиди, известни със широкия спектър от биологични активности. В тази връзка успешно бяха получени нови биофункционални хибриди съдържащи както 2-фенилетиламинов фрагмент, така и флурбипрофенов остатък в структурата на молекулата си (Фигура 1).



Фигура 1. Обща формула на новите флурбипрофенови хибриди.

Изследвана бе *in vitro* антиоксидантна, противовъзпалителна и антиартритна активности. *In vitro* противовъзпалителната и антиартритна активности, бяха оценени съответно чрез инхибиране денатурацията на албумин (IAD) и антитриптична активност (АТА). Също така, бе определена и липофилността им, както теоретично (Log*P*), така и експериментално (*R<sub>m</sub>*). Резултатите от проведените тестове показват, че съединение **2c** показва най-добра антиоксидантна активност. Всички биофункционални хибриди на флурбипрофен се характеризират с добра IAD. Съединенията **2b**, **2c**, **2d** и **2f** показват значителна АТА в сравнение с ибупрофен и флурбипрофен.

### БЛАГОДАРНОСТИ

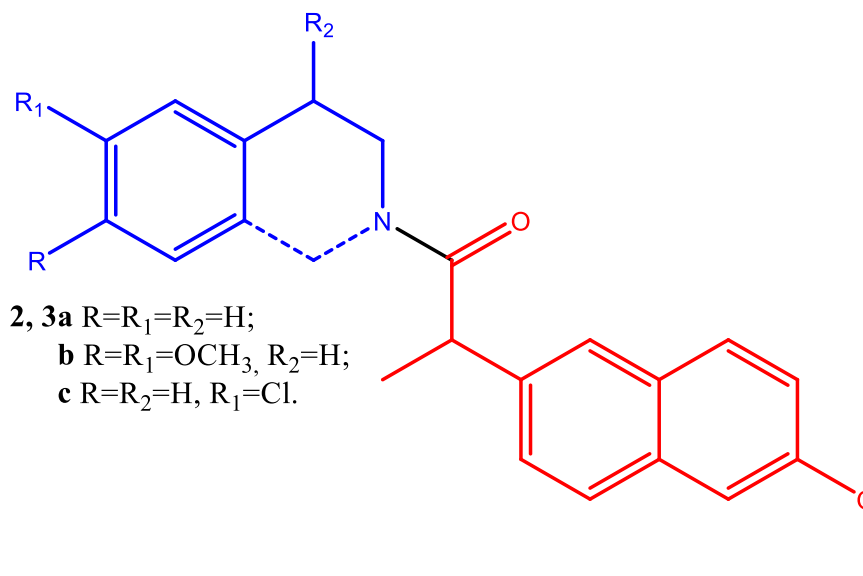
Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ към МОН, договор КП-06-М29/1.

## ИЗСЛЕДВАНЕ *IN VITRO* БИОЛОГИЧНАТА АКТИВНОСТ НА НОВИ БИОФУНКЦИОНАЛНИ ХИБРИДИ НА НАПРОКСЕН

Ивет Иванова, Димитър Божилов, Илиян Иванов, Станимир Манолов

Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24,  
ivettivanova@gmail.com

Напроксен или 2-(6-метоксинафтален-2-ил) пропановата киселина спада към групата на нестероидните противовъзпалителни средства. Изохинолиновите алкалоиди от друга страна са известни с големия набор от биологични активности. В тази връзка интерес представлява изследване *in vitro* биологичната активност на съединения обединяващи напроксенов фрагмент с изохинолиновата структура.



Фигура 1. Структурна формула на новите хибриди на напроксен.

На получените биофункционални хибриди на напроксен бе определена *in vitro* антиоксидантна активност, инхибиране денатурацията на албумин (IAD) и антитриптична активност (АТА). Резултатите от проведените тестове показват, че хибридите проявяват висока активност. Съединение **2c** се характеризира с най-висока активност в сравнение с останалите хибриди.

### БЛАГОДАРНОСТИ

Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ към МОН, договор КП-06-М29/1.

## **СЕКЦИЯ ФИТОХИМИЯ И ФАРМАКОГНОЗИЯ**

**Мила Димитрова, ФХФ - СУ**

**Анджелика Начева, ХФ - ПУ**

**Габриела Иванова, ХФ - ПУ**

**Сезан Феим, ХФ - ПУ**

**Иван Лаловски, ФХФ - СУ**

**Маргарита Клъстева, ФХФ - СУ**

**Асен Стоянов, ФХФ - СУ**

## ЛЕЧЕБНИ РАСТЕНИЯ ЗА ПЕДИАТРИЧНА УПОТРЕБА

Мила Димитрова, Анели Неделчева

СУ „Св. Кл. Охридски“, Факултет по химия и фармация, София 1164,  
бул. Джеймс Баучър 1, mila\_dr@abv.bg

В отговор на острата необходимост от разработване на специфични лекарствени продукти, предназначени за педиатричната популация, са редица съвременни насоки и документи [1], които на европейско ниво идентифицират проблемите, но същевременно изискват конкретен анализ за състоянието им в България. Настоящото изследване е с фокус върху растителните лекарствени продукти и употребата им при педиатричната популация, в съответствие със съвременните изисквания за ефективност и безопасност. Представени са резултати от етноботаническо проучаване за използването на растенията при лечението на деца в българската народна медицина. Използван е сравнителен анализ за диференциране на видовете, противоположни за употреба при таргетната група. Анализирани са 119 вида растения и получаваните от тях растителни вещества и препарати (146) – с традиционна и с добре установена употреба, и допълнени с резултати от етноботанически изследвания [2]. Определени са групите съединения и растителните вещества и препарати с данни за нежелани реакции, начин на приложение и потенциалните растителни видове, съгласно традиционната им употреба: (i) 1,8 цинеол/ *Eucalypti aetheroleum*, *Salvia officinalis*, *Melissa officinalis*, *Thymus* spp. (ii) ментол - (iii) пулегон и ментофуран/ *Menthae piperitae folium*, *Menthae piperitae aetheroleum*, *Mentha* spp.; (iv) естрагол/ *Anisi aetheroleum*, *Anisi fructus*, *Pimpinella anisum* (v) салицилати/ *Salicis cortex*, *Salix* spp., *Filipendula ulmaria*; (vi) антрахинони/ *Sennae folium*, *Sennae fructus*, *Rhei radix*, *Frangulae cortex*, *Rhamni purshianae cortex*, *Aloe*, както и (vii) растителни препарати от *Hedera helix* и *Echinacea pallida*. Изследването показва необходимост от обширен анализ на растителните видове, използвани в педиатричните продукти, и проучване на българските им популации за откриване на потенциално значими видове от генетичния фонд и безопасната им употреба.

Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проект 2901/КП-06-Китай/15/17.12.2020 г., ФНИ-МОН.

Цитати:

1. HMPC monographs: Overview of recommendations for the uses of herbal medicinal products in the paediatric population EMA/HMPC/228356/2012

2. Aziz, M.A., Pieroni, A., Abidullah, S., Nedelcheva, A., *Turk J Bot*, 2021, vol. 45, 713-722.

**ФРАКЦИОНИРАНЕ НА ПОЛИФЕНОЛНИЯ СЪСТАВ НА ОГНИЧЕ  
(*CHENOPODIUM BOTRYS*) С РАЗЛИЧНИ ПО ПОЛЯРНОСТ  
РАЗТВОРИТЕЛИ И ИЗСЛЕДВАНЕ НА ТЯХНАТА  
БИОЛОГИЧНА АКТИВНОСТ**

Анджелика Начева, Димитър Божилов, Станимир Манолов, Илиян Иванов

*Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24,  
andjelikanacheva@gmail.com*

Флавоноидите са основна група вторични метаболити в много лечебни растения. Те намират широко приложение при лечението на редица заболявания. В предишни наши проучвания е изследван полифенолният състав на *Chenopodium botrys*. От получените данни бе установено, че основните компоненти, които се съдържат в огничето са 6-метоксифлавонови [1]. Полифенолният състав е слабо изследван. Поради тази причина бяха използвани аналитични методи за анализ на общо фенолно съдържание (ОФС), съдържание на общи танини (СОТ), антиоксидантна и *in vitro* биологична активност. За целта полифенолният състав на огничето бе фракциониран с различни по полярност разтворители, а именно хексан, хлороформ, етилацетат и бутанол. Получените фракции бяха изследвани за ОФС, СОТ, антиоксидантна и *in vitro* биологична активност.

С най-високо съдържание на общи феноли и танини се характеризира етилацетатната фракция, също така тя показва най-висока антиоксидантна и биологична активност.

**БЛАГОДАРНОСТИ**

*Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ към ПУ, договор МУ21-ХФ-014.*

Цитати:

1. D. Vojilov, S. Dagnon, I. Ivanov, *Phytochemistry Letters*, 2017, vol. 20, 316–321.

## **ИЗОЛИРАНЕ НА ПОЛИФЕНОЛИ ОТ КОТЕШКА СТЬПКА (*CLINOPODIUM VULGARE*) С РАЗЛИЧНИ РАЗТВОРИТЕЛИ И ИЗСЛЕДВАНЕ НА ТЯХНАТА БИОЛОГИЧНА АКТИВНОСТ**

Габриела Иванова, Димитър Божилов, Станислав Манолов, Солея Даньо, Илиян Иванов

*Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24,  
stu2105678001@uni-plovdiv.bg*

Лечебните растения имат важно място в историята на човечеството. Употребяват се в традиционната медицина, като богати източници на съединения, способни да лекуват болка и неразположения. Знанията относно биоразнообразието на растенията във всеки географски регион и използването на тези растения в този регион имат фундаментално значение за разработването на нови лекарства срещу определени заболявания.

Растенията от семейство Устноцветни (Lamiaceae) са известни с широк спектър на действие в българската народна медицина. Член на семейството е котешката стъпка (*Clinopodium vulgare* L.). Билката е известна още като черновръх и див босилек. *Clinopodium vulgare* L. привлича вниманието на фитотерапевти и изследователи. Поради тази причина фракционирахме полифенолния състав с различни по полярност разтворители като използвахме хексан, хлороформ и етилацетат.

Съвременните биохимични методи за анализ дават възможност да се оцени *in vitro* биологичната активност на полифенолите от *Clinopodium vulgare* L.

## **ИЗОЛИРАНЕ, АНАЛИЗ НА ПОЛИФЕНОЛИ ОТ БЕЗСМЪРТНИЧЕ (*HELICHRYSUM ITALICUM* L.) И ИЗСЛЕДВАНЕ НА ТЯХНАТА ПОТЕНЦИАЛНА БИОЛОГИЧНА АКТИВНОСТ**

Сезан Феим, Димитър Божилов, Станимир Манолов, Илиян Иванов

Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Химически факултет,  
катедра Органична химия, ул. Цар Асен 24,  
skank1998@abv.bg

Безсмъртничето (*Helichrysum italicum*) известно като „вечното растение“ и се нарича още „билката на средиземноморието“. То е ендемит за района на Средиземно море – най-вече за Корсика, Сардиния. Интересът към билката се дължи най-вече на етеричното масло и неговото приложение. Поради тази причина вече се култивира и в България.

Изследванията ни са насочени в изследване на *in vitro* биологична активност на различни екстракти, получени от безсмъртниче. Приложени бяха биохимичните методи инхибиране денатурацията на албумин (ИДА) и антитриптична активност (АТА), чрез които се оцени *in vitro* противовъзпалителната и антиартритна активности на получените екстракти.

### **БЛАГОДАРНОСТИ**

Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ към ПУ, договор МУ21-ХФ-014.

## **ИЗПИТВАНЕ ЗА ЧИСТОТА И ИДЕНТИЧНОСТ НА ПРОДУКТИ, СЪДЪРЖАЩИ ПОЛСКИ ХВОЩ – ПРЕДВАРИТЕЛНО ПРОУЧВАНЕ**

Иван Лаловски, Маргарита Кръстева, 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*

*Equisetum arvense* L. (полски хвощ), сем. Equisetaceae, е тревисто растение от българската флора, разпространено по влажни места в цялата страна. В народната медицина се използва лятното стъбло (*Equiseti herba*), като диуретично, кръвоспиращо и ранозаздравяващо средство. Идентично разпространение има и друг представител от род *Equisetum* – *E. palustre* (блатен хвощ). В надземната си част съдържа отровни алкалоиди от палустринов тип – палустрин, палустридиен [1]. Възможно е смесване на *E. arvense* с *E. palustre*, при събиране на растителен материал, поради идентични ареали на разпространение и прилики в макроскопските характеристики на двата вида, което би направило получената суровина опасна и негодна за употреба.

В настоящото изследване е определена чистотата и идентичността на растителни вещества или чайови смеси на различни производители закупени от търговската мрежа, посочени като съдържащи *Equiseti herba*. Ваучерен материал от двата вида хвощ е събран от естествени находища. Чистотата и идентичността на *E. arvense* в изследваните проби е доказана посредством макроскопски, микроскопски и хроматографски анализи проведени съобразно методики описани в Европейската фармакопея [2]. Направена е и допълнителна визуализация на някои диагностични белези. Резултатите от трите метода са анализирани и е оценена корелацията между тях. Оптимизирана е процедурата за анализ на проби, съдържащи надземна част от лятно стъбло на *E. arvense*. Изчислена е честотата на примесите от *E. palustre* в изследваните проби. Получените резултати показват необходимостта от по-строг контрол върху идентификацията и събирането на растителен материал и използването му в лекарствени продукти, хранителни добавки и храни, с цел осигуряване на тяхната ефективност и безопасност.

*Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проект 2901/КП-06-Китай/15/17.12.2020 г., ФНИ-МОН.*

1. L. Cramer, L. Ernst, M. Lubienski, U. Papke, H. M. Schiebel et al., *Phytochemistry*, 2015, vol.116, 269–282
2. European Pharmacopoeia 10<sup>th</sup> edition, vol.1, 1825



## **АНАЛИЗ НА ПРИМЕСИ И ПОДМЕСИ В ПРОБИ ОТ ШАФРАН**

Асен Стоянов, Анели Неделчева

*СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, София 1164 бул.  
Джеймс Баучер 1, asenns@uni-sofia.bg*

Растителната субстанция *Croci stigma* (близалца от шафран), получавана от растението *Crocus sativus* L. (шафран), сем. Iridaceae, е позната като най-скъпата подправка в световен мащаб. Употребата на субстанцията в кулинарията и като компонент на гранични продукти (козметика и хранителни добавки) е известна от дълбока древност (2 300 г. пр.н.е.) и продължава до днес.<sup>[1]</sup> Високата цена, отчасти определяна от тежкия физически труд необходим за получаването на растителното вещество и ниския добив, води до опити за подмесване, които намалят качеството на крайния продукт. Потенциални подмеси могат да бъдат както други морфологични части на *C. sativus* L., така и други растителни вещества (части от други видове от рода *Crocus*, *Arnicae flos*, *Carthami flos*, *Calendulae flos* и др.). Обработването на нискокачествен шафран и подмеси с багрила (кармин и др.) също е известна лоша практика. Тези примеси могат да бъдат качествено определени посредством макроскопски, микроскопски и фитохимични методи.<sup>[2]</sup>

Последните години България също е производител на *Croci stigma*. Проби от субстанцията от търговската мрежа са взети и подложени на анализ за често срещаните подмеси. Растителните субстанции, използвани за подмесването на шафран, бяха оцветени с кармин и също подложени на анализ. Въз основа на извършените наблюдения е разработен ключ за откриването на подмеси за субстанцията *Croci stigma*.

*Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проект 2901/КП-06-Китай/15/17.12.2020 г., ФНИ-МОН.*

Цитати:

1. Rosalee S. Hellberg, Karen Everstine and Steven A. Sklare; Food Fraud; chapter 10. pp. 196; Published 2021; ISBN: 978-0-12-817242-1
2. Leena Kumari, Pranita Jaiswal, S. Swarupa Tripathy; Various techniques useful for determination of adulterants in valuable saffron: A review; *Trends in Food Science & Technology*, 2021, vol. 111, 301–321

## **СЕКЦИЯ НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ**

**Красимир Колев, ФХФ - СУ**

**Яна Димитрова, ФХФ - СУ**

**Яна Димитрова, ФХФ - СУ**

**Кристиян Веселинов, ИОНХ - БАН**

**Елжана Енчева, ФХФ - СУ**

## **ВЛИЯНИЕ НА ОТДЕЛЯНЕТО НА ВОДОРОД В ПРОЦЕСА НА ЕЛЕКТРОХИМИЧНО ПОЛУЧАВАНЕ НА ЧИСТО ЖЕЛЯЗО ОТ ХЛОРИДЕН ЕЛЕКТРОЛИТ**

Красимир Колев, Борис Яначков, Людмил Лютов

*СУ, Факултет по Химия и Фармация, гр. София, бул. Джеймс Баучер №1,  
krasimirusew@gmail.com*

При електрохимичното получаване на желязо от хлориден електролит, катодната ефективност по ток е със стойност ~ 90%. Това се дължи на факта, че част от тока внесен в системата не се изразходва за отелектризиране на  $Fe^{2+}$  йоните до метал, а за протичане на странични реакции. Основната конкурентна реакция е на отелектризиране на  $H^+$ -йоните до водород. Водородните мехурчета могат да се задържат продължително време върху катодната повърхност и да доведат до образуване на празнинни дефекти в получените железни покрития, влошавайки техните механични качества и корозионна устойчивост. Освен чрез натрупване под формата на мехурчета по повърхността, водородът прониква в желязното покритие посредством дифузия. В следствие на дифузията в обема на покритието се образуват структурни дефекти при ефект известен като водородно окрежкостяване (hydrogen embrittlement). Като етап от цялостна работа за изготвяне на железни образци за механични изпитания е разработен метод за получаване на електрохимично чисто желязо с отсъствие на празнинни дефекти, основаващ се на предотвратяване на задържането на водород под формата на мехурчета върху катодната повърхност. Дефектите генерирани от водородното окрежкостяване са премахнати посредством отгряване на железните образци. Получен е продукт от електрохимично чисто желязо с характеристики – съизмерими с тези на утвърдени производители, имащ предимството да е със значително по-ниска цена за получаване.

Цитати:

1. Charles W. Noon, *Electro-deposition of Iron from a Chloride bath*, Montana School of Mines, 1947.
2. Charles Kasper, *Rapid Electrodeposition of Iron from Ferrous Chloride Baths*, Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1937, vol. 18.
3. Mordechai Schlessinger, *Modern Electroplating 5<sup>th</sup> Edition*, 2010.

## КОМПЛЕКСИ НА ЛАНТАНОИДНИ ЙОНИ С 2-ХЛОРО-1,10- ФЕНАНТРОЛИН

Яна Димитрова<sup>1</sup>, Румен Ляпчев<sup>2</sup>, Михаил Коларски<sup>2</sup>, Мартин Цветков<sup>1</sup>, Йоана Захаријева<sup>1</sup>, Деница Еленкова<sup>1</sup>

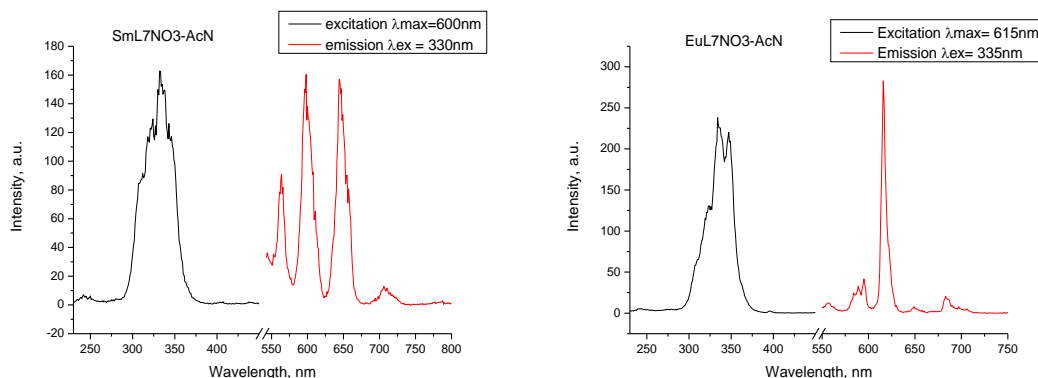
<sup>1</sup> СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Неорганична Химия, пощенски адрес бул. "Джеймс Баучер" №1, e-mail: yanadim123@gmail.com

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

Синтезирани са комплекси на Eu (III) и Sm (III) с 2-хлоро-1,10-фенантролин с цел изследване на антена ефекта на използвания лиганд<sup>1</sup>. Проследено е влиянието на няколко различни фактора върху структурата и оптичните свойства на получените проби. Приложени са различни синтетични метода, като е променяно съотношението метал към лиганд, както и използвания разтворител. Интерес представлява използването на тиоцианати на Sm (III), вместо нитрати и получените различия в структурата и свойствата на комплексите<sup>2</sup>.

Получените прахови проби са подложени на допълнителни анализи за определяне на структурата чрез PXRD, IR, NMR и елементен анализ. Оптичните им свойства са изследвани чрез UV/VIS и флуоресцентна спектроскопия.

Наблюдавани са характеристични емисионни преходи при комплексите с Eu(III) и Sm(III)<sup>3</sup> и наличието на антена ефект (фиг.1).



Фигура 1. Спектри на възбуждане и емисия на комплекса на Sm(III) и Eu(III) с L7 и противойон NO<sub>3</sub><sup>-</sup>.

**Благодарност:** Авторите изразяват благодарност за финансовата подкрепа на проект № КП-06-Н39/1 финансиран от Фонд „Научни изследвания“

Цитати:

1. Akerboom, S. et.al., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2013**, No. 36, 6137–6146.
2. Cotton, S. A. et.al., *Polyhedron* **2003**, 22 (11), 1489–1497.
3. Petoud, S., *Chim. Int. J. Chem.* **2009**, 63 (11), 745–752.

## СИНТЕЗ НА ЛАНТАНОИДНИ МЕТАЛ-ОРГАНИЧНИ РАМКИ ПО СОЛВОТЕРМАЛЕН МЕТОД

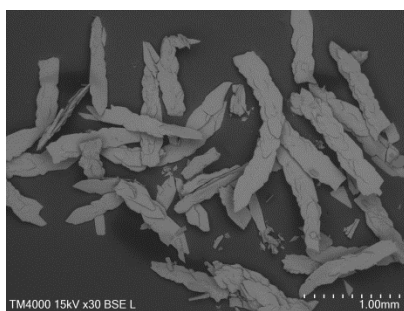
Яна Димитрова, Мартин Цветков, Деница Еленкова

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

Целта на настоящата работа е да се синтезират лантаноидни луминесцентни метал-органични рамки (Ln-MOFs) по солвотермален метод с потенциално приложение, като сензори.<sup>1</sup> Подбрани са четири лантаноидни йона: Dy (III), Sm (III), Tb (III) и Eu(III). За основен линкър е използвана терафталова киселина<sup>2</sup>, като са направени опити да се комбинира с втори линкър.

Солвотермалният метод е класически подход за синтез на метал-органични рамки и е най-често използван при получаването на такъв тип материали. Подходът е изключително гъвкав и дава възможност за контрол върху вида на получения MOF и върху неговите физикохимични свойства, чрез контрол над температурата, рН, както и чрез комбиниране на различни разтворители.

Получените проби са изследвани чрез PXRD, IR, BET, SEM (фиг.1а), UV/VIS, както и флуоресцентна микроскопия (фиг.1б) и спектроскопия.



(а)



(б)

Фигура 1. Снимки Dy (III) с терафталова киселина (а) SEM; (б) микроскоп на просвет.

**Благодарност:** Авторите изразяват благодарност за финансовата подкрепа на проект 80-10-7/10.05.2022 финансиране от държавния бюджет - конкурс 2022.

### Цитати:

1. Jin, J. et.al., *Dalt. Trans.* **2021**, 50 (6), 1950–1972.
2. Le Natur, F. et.al., *J. Mol. Struct.* **2015**, 1086, 34–42.

## **СТРУКТУРНА ТРАНСФОРМАЦИЯ, ИНДУЦИРАНА СЛЕД ИНТЕРКАЛАЦИЯ НА ЛИТИЙ, НА $\text{Na}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$ С АЛУАУДИТЕН ТИП СТРУКТУРА В ОРТОРОМБИЧЕН $\text{Li}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$**

Кристиян Веселинов, Деляна Маринова, Мария Калъпсъзова, Екатерина Жечева,  
Радостина Стоянова

*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*

Стремежът на човечеството към технически прогрес се поражда от непрекъснатото растящите енергийни нужди. Те от своя страна предизвикват непрекъснато търсене и разработване на нови енергийни носители, които да са по-дълготрайни, по-екологични и по-евтини от настоящите. Батериите започват развитието си още от първия галваничен елемент и в момента най-разпространени все още са литиево-йонните батерии, които намират широко приложение в редица области.

Настоящото съобщение продължава изследванията ни върху получаването и охарактеризирането на двойни сулфатни соли на лития и натрия с манган,  $\text{Na}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$  със структура от алуаудитен тип и орторомбичен  $\text{Li}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$ . След успешният синтез на до 100 % чисти фази електрохимичните тестове в различни електролитни среди показват структурни трансформации при обратимата интеркалация на  $\text{Li}^+/\text{Na}^+$  йони.

Ние демонстрираме, с помощта на *ex-situ* трансмисионна електронна микроскопия, че интеркалирането на литий в алуаудит  $\text{Na}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$  протича в наномасщаб и води до образуване на орторомбична фаза  $\text{Li}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$ . Анализът на електрохимичните данни показва, че  $\text{Li}_2\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$  е в състояние да интеркалира обратимо най-малко 1 мол Li само в случай, когато се използва електролит на базата на йонна течност. Получените резултати разкриват, че чрез рационална оптимизация на добавките и състава на електролита сулфатният електрод може да подобри драстично своите електрохимични свойства.

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

Цитати:

1. D. Marinova, K. Veselinov, M. Kalapsazova, E. Zhecheva, R. Stoyanova, *Materials Today: Proceedings*, 2022,  
<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.02.559>.

**МЕХАНОХИМИЧЕН СИНТЕЗ НА  $\text{LaFeO}_3$  И НЕГОВОТО  
ПРИЛОЖЕНИЕ ЗА ЕФЕКТИВНО ПРЕМАХВАНЕ НА  
АНТИБИОТИЦИ ВЪВ ВОДИ ЧРЕЗ СУЛФАТНА РАДИКАЛОВА  
ФОТО-ФЕНТЪН РЕАКЦИЯ**

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,  
eencheva97@gmail.com*

В последните години механохимията се смята за един от най-подходящите методи за синтез в така наречената „зелена химия“ поради, това че не се използват разтворители. Материалите, получени по механохимичен начин, имат редица преимущества като висока специфична повърхност, стабилизиране на метастабилни фази, висока концентрация на дефекти в кристалната структура. Тези характеристики правят механохимичния синтез изключително подходящ за получаване на хетерогенни катализатори за различни процеси.

В настоящата работа е представен механохимичен синтез на  $\text{LaFeO}_3$  и неговото потенциално приложение като катализатор за активиране на пероксидисулфат във фото-Фентън-подобна реакция за пречистване на води от органични замърсители. Като моделен замърсител е използван антибиотикът тетрациклин хидрохлорид. Получените катализатори са охарактеризирани чрез редица физикохимични методи. Направено е сравнение с материали, получени по класически цитратен зол-гел метод. Определено е влиянието на редица параметри върху каталитичната активност на материалите, сред които добавките по време на механохимичния синтез, рН на изследваните води, облъчващата светлина. Получените резултати показват предимството на механохимичния синтез за получаване на катализатори за пречистване на води.

*Благодарности: Изследванията са финансирани от Фонд „Научни изследвания“ чрез Договор КП-06-Н59/12*

## **СЕКЦИЯ КАТАЛИЗ**

**Мануела Ойкова, ОРММ, ИОНХ - БАН**



## **ХИДРОДЕМЕТОКСИЛИРАНЕ/ДЕАЛКИЛИРАНЕ НА БИФУНКЦИОНАЛЕН НАНОРАЗМЕРЕН ЗЕОЛИТ БЕТА**

М. Ойкова<sup>1</sup>, М. Попова<sup>1</sup>, Х. Лазарова<sup>1</sup>, А. Сегеди<sup>2</sup>, П. Шестакова<sup>1</sup>, Н. Косева<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия – Българска академия на науките, Manuela.Oykova@orgchm.bas.bg*

<sup>2</sup> *Институт за материалите и химия на околната среда, Будапеща, Унгария*

<sup>3</sup> *Институт по полимери – Българска академия на науките, nellykoseva@gmail.com*

Оползотворяването на лигноцелулозната биомаса за получаване на ценни химикали, материали и горива се очертава като обещаваща алтернатива за намаляване на зависимостта от изкопаеми горива. В зависимост от своя произход биомасата е съставена от целулоза, хемицелулоза и лигнин в различно съотношение. Чрез предварителната обработка от целулозата и хемицелулозата се получават ценни С5- и С6-платформени молекули. През последните години, значителни усилия бяха насочени към деполимеризация на лигнин и разработване на процеси за превръщане на получените платформени съединения в ценни за индустрията продукти. Каталитичните процеси на деметоксилиране и деалкилиране водят до превръщане на алкилфенолите, получени при деполимеризацията на лигнин, до фенол, което се осъществява в присъствие на бифункционални катализатори.

В настоящето изследване са получени монометални (Ni, Ru, Pt) и биметални (Ni-Pt, Ru-Pt) наноразмерни Beta зеолитни катализатори чрез импрегниране с омокряне. Получените катализатори са изследвани в реакция на хидродеметоксилиране и деалкилиране на 2-метокси-4-пропилфенол в газова фаза. Получените катализатори са характеризирани с редица физикохимични методи като прахова рентгенова дифракция, трансмисионна електронна микроскопия, инфрачервена спектроскопия, азотна физисорбция, температурно-програмирана редукция и ядреномагнитна спектроскопия в твърда фаза. Каталитичното поведение на материалите е изследвано в реакция на хидродеметоксилиране на 2-метокси-4-пропилфенол. Образуване на фино дисперсни никел-, рутений- и платина-оксидни частици са регистрирани върху моно- (Ni, Ru и Pt) и биметалните (Ni-Pt, Ru-Pt) зеолитни катализатори. Установено е, че част от никела в Ni-съдържащи катализатори е в йонни позиции в зеолитната решетка. Резултатите показваха, че биметалният 5Ru1Pt-модифициран Beta зеолит е високоактивен и стабилен катализатор за селективно получаване на фенол чрез хидродеметоксилиране на 2-метокси-4-пропилфенол в газова фаза. Биметалните катализатори показваха висока стабилност в изследваната реакция.

*Благодарности: Авторите изказват благодарност по проект за двустранното сътрудничество между Българска академия на науките и Унгарска академия на науките по проект: HU/02/2022-2023.*