XXI НАЦИОНАЛНА КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИЯ ЗА СТУДЕНТИ И ДОКТОРАНТИ

17-19 май 2023 г. СОФИЯ

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

XXI Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2023
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/scc2023/

XXI 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. Николай Денков, СУ
акад. проф. Константин Хаджииванов, БАН
акад. проф. Христо Цветанов, БАН
проф. Пламен Петков, ХТМУ
проф. Юрий Кълвачев, БАН

ОРГАНИЗАЦИОНЕН КОМИТЕТ
проф. Георги Вайсилов, СУ
проф. Християн Александров, СУ
проф. Петко Петков, СУ
доц. Искра Колева, СУ
гл. ас. Ана Колева, СУ
ас. Кристина Симеонова, СУ
ас. Николай Даскалов, СУ
докторант Стоян Граматиков, СУ
студент Баян Карапенчев, СУ
студент Бояна Събчева, СУ
студент Димитрина Йотова, СУ
студент Ивана Христова, СУ
студент Поля Колева, СУ

XXI Национална конференция по химия за студенти и докторанти
Програма

17 май 2023, 130 аудитория на ФХФ, СУ

09:40 10:00 **Регистрация,** пред 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

10:00 11:00 **Откриване, 130 аудитория**, Факултет по химия и фармация на СУ

Лекция на проф. Кирил Попов, Каселски университет, Германия

„Диамантите са най-добрият приятел на учените“

130 аудитория на ФХФ, СУ

Секция „Chemical Engineering and Chemical Technologies”

11:00 11:20 Julia Heupel, M. Pallmann, J. Körber, J. P. Reithmaier, D. Hunger, C. Popov
“Technological aspects of the fabrication of thin single-crystal diamond membranes with low surface roughness for quantum photonics”

11:20 11:40 Daniel Merker, D. Bertinetti, R. Merz, M. Kopnarski, F. W. Herberg, C. Popov
“Enhanced protein immobilization by photochemical attachment on nanostructured ultrananocrystalline diamond surfaces”

11:40 12:00 Miriam Mendoza Delgado, J. Thieme, K. Singer, C. Popov
“Fabrication steps for realization of quantum tokens”

12:00 12:20 Lukas Wolfram, C. Popov, T. Fuhrmann-Lieker
“*Generating wrinkling structures via Monte-Carlo-Simulation using a Truchet-Ising-model”*

12:20 13:40 Обедна почивка

Секция „Изчислителна химия“

13:40 14:00 Баян Карапенчев, И. Колева, Хр. Александров
„Квантовохимично моделиране на нитратни частици, адсорбирани върху CeO_2(110) и CeO_2(100) повърхности“

14:00 14:20 Поля Колева, И. Колева, Хр. Александров
„Квантовохимично моделиране на взаимодействието на въглероден оксид с наночастици на преходни метали“

14:20 14:40 Стоян Граматиков, П. Петков, Г. Вайсилов
„Квантовохимично изследване на зеолит с решетка тип RHO“

14:40 15:00 Вероника Петкова, Хр. Рашеев
„Моделиране на фрагменти от неграфитизиран въглерод като аноден материал в Na-йонни батерии“

15:00 15:20 Кафе-пауза

15:20 15:40 Илия Кичев, Л. Бориславов, Ю. Романова
„SingletBridge – програма за генериране на нови вътрешномолекулни хромофори за синглетно разцепване“

15:40 16:00 Владислава Петкова, В. Николова, С. Ангелова
„Теоретично моделиране на комплекси на мастноразтворими витамини с β-циклодекстрин“

Секция „Аналитична химия“

16:00 16:20 Катерина Михайлова, Б. Костова, Б. Думанов
„Приложение на химични методи с възможност за осъществяване на консервационно-реставрационни дейности“

16:20 16:40 Ава Амидеина, А. Джугдан, П. Манджуков
„Валидиране на калибрационен модел. Оценка на риска при избора на калибрационна функция.“

16:40 17:00 Кафе-пауза

17:00 17:20 Николай Петков, И. Панчева
„Координационни съединения на Монензин с Fe(III) – синтез, структура и биологична активност”

17:20 17:40 Николай Даскалов, Зл. Даскалова, И. Колева, Хр. Цачев
„Анализ на лекарствени продукти от аптечната мрежа, съдържащи ибупрофен – профили на освобождаване“

Секция „Полимери“

17:40 18:00 Стефания Гайдарова, Хр. Цачев
„Липидни наночастици – от лабораторията до пациента“

18 май 2023, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Химични технологии и инженерна химия“

09:00 09:20 Мартин Пантов, Д. Чолакова, С. Чолакова, Н. Денков
„Характеризиране на структурата на ротаторни фази в смеси от алкани“

09:20 09:40 Александра Тодорова, Д. Чолакова, С. Чолакова, Н. Денков
„Реологично характеризиране на свойствата на поликристални липиди“

09:40 10:00 Анита Бисерова, Д. Чолакова, С. Чолакова, Н. Денков
„Деформиране на триглицеридни емулсионни капки при охлаждане“

10:00 10:20 Вяра Йорданова, З. Митринова, С. Чолакова
„Влияние на койоните върху реологията на разтвори на натриев додецил етер сулфат“

10:20 10:40 Кафе-пауза

10:40 11:00 Маноела Алексиева, Р. Станимирова, Кр. Данов, Й. Петков
„Взаимодействие на катионни и нейонни повърхностно активни вещества“

11:00 11:20 Диана Ковачева, В. Яврукова, Кр. Маринова, Кр. Данов, Й. Петков
„Омокряне и морфология на слоеве от катионни и нейонни ПАВ върху твърди повърхности“

11:20 11:40 Татяна Славова, Кр. Маринова, Р. Станимирова, Кр. Данов
„Почистване на изкуствена кожа: оптично наблюдение и охарактеризиране“

11:40 12:00 Стефани Паскова, М. Темелска, Д. Газолу-Русанова, С. Чолакова
„Роля на разтворителя върху почистващото действие на повърхностно-активните вещества“

12:00 13:00 Обедна почивка

13:00 13:20 Петър Борисов, Ф. Мустан, З. Митринова, С. Чолакова
„Есцин като нейонен и анионен сърфактант: Ефект от концентрацията на електролит и pH върху реологията и повърхностните свойства на разтвори“

13:20 13:40 Ана-Мария Гюргинчева, Р. Станимирова, Кр. Г. Маринова
„Повърхностни и обемни свойства на разтвори на смеси от нейонни и анионни ПАВ“

13:40 14:00 Ралица Узунова, Р. Станимирова, Кр. Данов, Т. Гърков
„Кинетика на адсорбция на летливи амфифили и последваща десорбция от наситена водна капка към въздуха“

14:00 14:20 Васил Георгиев, Кр. Стефанова, З. Митринова, С. Чолакова
„Ефект от добавянето на глицерол върху пенливостта и пенната стабилност“

14:00 14:20 И. Лесов, Христо Александров, Б. Иванов, Д. Девалоапие, С. Чолакова
„Кинетика на разтваряне на мехурчета под налягане – роля на наноструктурата на дисперсията“

14:40 15:00 Кафе-пауза

15:00 15:20 Владимир Петков, З. Винаров, С. Чолакова
„Стабилизиране на преситени разтвори на глибенкламид с помощта на целулозни полимери и жлъчни киселини“

15:20 15:40 Лора Манова, Л. Винарова, С. Чолакова, З. Винаров
„Роля на носителите в липидни формулировки върху солюбилизацията на фенофибрат в мицели на жлъчни киселини“

15:40 16:00 Поля Иванова, Л. Винарова, Т. Боянов, К. Тистаерт, Ян Бевернаж, С. Чолакова, З. Винаров
„Солюбилизация на хидрофобни лекарствени вещества в моделни чревни течности: ефект от вида на липидите“

16:00 16:20 Теодор Боянов, Л. Винарова, К. Тистаерт, Ян Бевернаж, С. Чолакова, З. Винаров
„Солюбилизация на хидрофобни вещества в колоидни агрегати в моделни чревни течности“

16:20 16:40 Кафе-пауза

16:40 17:00 Йоана Петрова, В. Петков, Л. Винарова, Г. Михов, С. Чолакова, З. Винаров
„Методи за енкапсулиране на протеин в полиестерамиден полимер“

Секция „Физикохимия“

17:00 17:20 Васил Иванов, В. Тончев
„Протокол за валидиране на опростен модел на кристализация в условията на изчерпващо се пресищане“

17:20 17:40 Димитър Шандурков, Н. Данчова, В. Петров, С. Гуцов
„Луминесцентни нанокомпозитни материали: получаване, структура и свойства“

17:40 18:00 Трифон Т. Попов, С. Христова, А. Живков
„Протеин-минерални композитни частици с антираково действие: монтморилонитови нанопластинки с електростатично адсорбиран цитохром С“

19 май 2023, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Биохимия“

09:00 09:20 Хашим Хашимов, А. Александрова, Б. Кадинов, А. Анастасов
„Приложение на фитостероли при лечение и профилактика на туморни заболявания“

09:20 09:40 Цветомир Кирилов, А. Иванова, Л. Петров, И. Богданов, П. Гатева

„Потенциален ефект на използваните днес антидиабетни терапии върху диабетната полиневропатия“

Секция „Фитохимия и фармакогнозия“

09:40 10:00 Л. Стоянова, Вероника Петрова, Д. Киркова, М. Дочева, Й. Кочев, В. Дурева, Й. Стремски, С. Статкова-Абегхе

„Скрининг на общо фенолно съдържание и антиоксидантна активност на био тютюн и лечебни растения от България“

10:00 10:20 Асен Стоянов, А. Неделчева

„Прогностичен анализ на растителни вещества от традиционната китайска медицина (ТКМ) за наличие на афлатоксини“

10:20 10:40 Кафе-пауза

Секция „Фармацевтична химия“

10:40 11:00 Мирослав Маринчев, Н. Христова-Авакумова, Н. Анастасова, Г. Владимирова, Д. Янчева

„Антиоксидантна активност и радикал-улавящ ефект на хидразонови производни на 5-метоксииндол-2-карбоксилна киселина“

11:00 11:20 Савина Стоянова, Й. Глухчева, С. Стойкова, В. Атанасов, М. Богданов

„Хетероциклени гама-бутиробетаини като потенциални метаболитни модулатори – in vivo изследвания“

11:20 11:40 Стефан Касабов, Н. Анастасова, Д. Стефанова, Н. Христова-Авакумова, И. Георгиева, Р. Цонева, Д. Янчева

„Синтез и охарактеризиране на N-алкилирани бензимидазолови хидразони и изследване на цитотоксичност, невропротекция, антиоксидантна активност и възможност за пермеация през кръвно-мозъчната бариера“

Секция „Органична химия“

11:40 12:00 Николай Лазаров

„Предвиждане свойства на йонни течности посредством прости корелации“

12:00 13:00 Обедна почивка

13:00 13:20 Пламен Чорбаджиев, Д. Гергинова, С. Симова

„Химично профилиране на български търговски и занаятчийски бири чрез ЯМР спектроскопия“

13:20 13:40 Надежда Бозова, А. Василев, С. Илиева, Д. Чешмеджиева

„Цианинови багрила за маркиране на нуклеинови киселини“

13:40 14:00 Едже Сюлейман, М. Бъчварова, Й. Стремски, С. Статкова-Абегхе, Д. Киркова, М. Дочева

„Синтез и радикал-улавяща активност на 2-заместени бензоазоли съдържащи резорцинолов фрагмент“

14:00 14:20 Мария Бъчварова, Й. Стремски, Б. Горанов, З. Денкова, Ст. Статкова-Абегхе, Пл. Ангелов, Ил. Иванов

„Синтез и антимикробна активност на халогенирани камалексини“

14:20 14:40 Кафе-пауза

14:40 15:00 Десислава Станишева, О. Петров

„Синтез на нов клас феноксикарбоксилни и хидроксамови киселини с потенциална растеж-регулираща активност“

15:00 15:20 Юлиян Романов, А. Колева, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова

„Влияние на реакционните условия върху хода на димеризация при заместени кумарин-3-карбоксилати“

15:20 15:40 Константин Константинов, М. Мутовска, Ю. Загранярски

„Синтез на дибензофуранови и индолокарбазолови производни за приложение като сини емитери“

15:40 16:00 Ивелина Маджарова, Р. Ляпчев, А. Колева, И. Колева, К. Симеонова, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова

„Синтез на флуоресцентни кумарини и фосфор-съдържащите им аналози чрез паладий катализирани реакции“

16:00 16:20 Кафе-пауза

Секция „Катализ“

16:20 16:40 Евангелия Петрова, Д. Николова, М. Габровска, Ю. Кръстич

„Каталитично хидрогениране на растителни масла – универсален метод за производство на хидрогенирани мазнини“

16:40 17:00 Мануела Ойкова, М. Попова, А. Сегеди, Н. Косева, П. Шестакова, М. Р. Михали

„Получаване на фенол върху модифицирани йерархични ZSM-5 зеолити“

17:00 17:20 Стефани Петрова, М. Цветков, М. Миланова

„Синтез, охарактеризиране и фоторедукционни свойства на твърди разтвори от типа $Tb_{1-x}Ce_xVO_4$*“*

17:20 17:40 Павел Николов, М. Цветков, М. Миланова

„Фотофизични и фотокаталитични свойства на дотиран с неметали $g\text{-}C_3N_4$*“*

17:40 18:00 Кафе-пауза

Секция „Неорганична химия“

18:00 18:20 Яна Димитрова, М. Цветков, М. Миланова, Д. Еленкова

„Сензорни свойства на лантаноидни метал органични рамки (Ln-MOFs) с терефталова киселина“

18:20 18:40 Елжана Енчева, М. Цветков, Р. Ляпчев, Й. Захариева

„Синтез, кристална структура и луминесцентни свойства на нови Tb(III) комплекси с производни на 1,10-фенантролин“

18:40 19:00 Савина Колева, Д. Еленкова, М. Миланова, И. Георгиева

„Синтез и луминесцентни свойства на Eu(III) и Sm(III) комплекси с дитиокарбаматни и бетадикетонатни лиганди“

19:10 19:30 Закриване, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

19:30 Коктейл, пред 210 аудитория

СЕКЦИЯ
"CHEMICAL ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGIES"

Julia Heupel - University of Kassel

Daniel Merker - University of Kassel

Miriam Mendoza Delgado - University of Kassel

Lukas Wolfram - University of Kassel

TECHNOLOGICAL ASPECTS OF THE FABRICATION OF THIN SINGLE-CRYSTAL DIAMOND MEMBRANES WITH LOW SURFACE ROUGHNESS FOR QUANTUM PHOTONICS

Julia Heupel[1], Maximillian Pallmann[2], Jonathan Körber[2,3], Johann P. Reithmaier[1], David Hunger[2], and Cyril Popov[1]

[1] *Institute of Nanostructure Technologies and Analytics (INA), University of Kassel, Heinrich-Plett-Str. 40, 34132 Kassel, Germany, j.heupel@ina.uni-kassel.de*
[2] *Physikalisches Institut, Karlsruher Institute für Technologie (KIT), Wolfgang-Gaede-Str.1, 76131 Karlsruhe, Germany*
[3] *Physikalisches Institut, University of Stuttgart, Pfaffenwaldring 57, 70569 Stuttgart, Germany*

Due to its exceptional physical and chemical characteristics, single-crystal diamond (SCD) in a form of thin membranes is a particularly promising material for the fabrication of high-quality photonic devices. Especially for envisioned applications in quantum information technologies (QITs), such as quantum memories and quantum communication, SCD gained, as a host material, an ever-increasing scientific interest based on remarkable properties of different color centers in its crystal lattice, e.g. nitrogen-vacancy (NV) centers, serving as single-photon emitters.

To structure µm-thin SCD membranes with a good quality, it is important to minimize defects originating from polishing or etching procedures. Here we report on the overall fabrication process with its optimizations of SCD membranes, with diameters from 500-600 µm and thickness from several µm down to 600 nm, exhibiting a low surface roughness around 0.2 nm on a small area scale (4 x 4 µm²), by means of inductively coupled plasma reactive ion etching (ICP-RIE). To avoid trenches and cracks at the membrane's edges, a diamond bulk mask with angled sidewalls was utilized as an etch mask. With the help of a planarization procedure, consisting of a combination of different Ar/Cl_2 recipes with low etch rates and utilizing the Ar/Cl_2 chemistry, surface defects e.g., "nano-grooves" from polishing are minimized and smooth surfaces are acquired. Severe micro-masking can be prevented by the application of a cyclic $Ar/Cl_2 + O_2$ recipe, allowing finally the fabrication of defect-minimized and planarized SCD membranes by the application of an angled bulk diamond mask as etch mask. Via van der Waals forces the high-quality SCD membranes are bonded on plane cavity mirrors and optically characterized in a fiber-based Fabry–Pérot microcavity system regarding their mode structure and finesse. Additionally, we present our progress in the structuring of several photonic elements in SCD membranes, namely 2D and 1D photonic crystal cavities.

ENHANCED PROTEIN IMMOBILIZATION BY PHOTOCHEMICAL ATTACHMENT ON NANOSTRUCTURED ULTRANANOCRYSTALLINE DIAMOND SURFACES

Daniel Merker[1], Daniela Bertinetti[2], Rolf Merz[3], Michael Kopnarski[3], Friedrich W. Herberg[2], and Cyril Popov[1]

[1] *Institute of Nanostructure Technologies and Analytics (INA), Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT), University of Kassel, Heinrich-Plett-Str. 40, 34132 Kassel, Germany, merker@cinsat.uni-kassel.de*

[2] *Department of Biochemistry, Center for Interdisciplinary Nanostructure Science and Technology (CINSaT), University of Kassel, Heinrich-Plett-Str. 40, 34132 Kassel, Germany*

[3] *Institut für Oberflächen- und Schichtanalytik GmbH, Trippstadter Str. 120, 67663 Kaiserslautern, Germany*

Investigations of molecular mechanisms related to the formation and maintenance of the inner clocks (e.g. circadian rhythm) require detection of different coupling factors, such as secreted neuropeptides and neurotransmitters, that mediate synchronization by ensemble formation of specialized clock neurons. In this work we study the application of ultrananocrystalline diamond (UNCD) thin films as biosensors for the detection of such coupling factors. The crucial part is the feasibility of protein immobilization in sufficient amounts on UNCD surfaces. From all investigated coupling routs only photochemical attachment of alkenes, exploiting the negative electron affinity (NEA) of hydrogen terminated diamond, gave acceptable results when green fluorescent protein (GFP) was immobilized on UNCD films. A process to create nanostructures was developed to increase the available surface area for protein immobilization. Both photochemical functionalization and structuring have beneficial effects on immobilization performance on their own, but especially in combination the immobilization efficacy increases significantly [1]. Lastly, the immobilization of different binding proteins against GFP - antibodies, nanobodies and DARPins - was investigated, with the last two showing promising results for high-specificity and affinity to capture the target molecules (coupling factors) in a future UNCD biosensor.

References:

[1] Merker et al., Diamond & Related Materials, 136 (6), **2023**, p. 109898

FABRICATION STEPS FOR REALIZATION OF QUANTUM TOKENS

Miriam Mendoza Delgado[1], Jan Thieme[2], Kilian Singer[2], Cyril Popov[1]

[1] *Institute of Nanostructure Technologies and Analytics, University of Kassel, Germany,* miriam.md@ina.uni-kassel.de, popov@ina.uni-kassel.de

[2] *Institute of Physics, University of Kassel, Germany,* jan.thieme@physik.uni-kassel.de, ks@uni-kassel.de

Nitrogen-vacancy (NV) color centers in the diamond lattice are fluorescent defects which possess "atom-like" properties and can be implemented as single photon sources with high optical stability and quantum yield, even at room temperature [1]. Furthermore, the coherent electron spin of the NV can be used as a long lived qubit which can be applied in quantum information technology, e.g. in quantum repeaters or tokens [2]. The high refractive index of diamond (2.4) leads to a low photon out-coupling at the diamond-air interface due to internal reflection. Therefore, in order to enhance the photon emission from NV centers and the collection efficiency, they are incorporated in photonic structures, like nanopillars [3].

The aim of the current work is the fabrication of diamond nanopillars incorporated with NV color centers and integrated with microwave antennas and electrodes, for the realization of a quantum token demonstrator. The fabrication process of arrays of monocrystalline diamond nanopillars with diameters between 150 nm and 250 nm, 1 µm height and center-to-center (CTC) distance of 10 µm consisted of their definition by electron beam lithography (EBL) applying hard mask and subsequent inductively coupled plasma reactive ion etching (ICP-RIE) with oxygen. The major parameters of the etching process, like ICP power, RF power, working pressure, O_2 flow, etc. were varied to optimize the quality of the nanopillars and the etching rate. Different materials are applied as a hard mask in order to reduce the erosion during the etching, which leads to tapering of the pillars. In addition, several techniques were implemented for the creation of NV centers in diamond, which can affect both the density and the properties of the NVs. The analyzed techniques are ion implantation, chemical vapor deposition (CVD) overgrowth and femtosecond laser irradiation. The presence of defects causing NV center decoherence should be evaluated for each process and optimized by varying the key process parameters of each technique.

References:
1. S. Pezzagna et al., *New J. Phys.*, 2011, vol. 13, 035024
2. J. Wrachtrup and F. Jelezko, *J. Phys.: Condens. Matter*, 2006, vol. 18, S807
3. B.J.M. Hausmann et al., *Diamond & Related Materials*, 2010, vol. 19, 621–629

GENERATING WRINKLING STRUCTURES VIA MONTE-CARLO-SIMULATION USING A TRUCHET-ISING-MODEL

Lukas Wolfram[1,2], Cyril Popov[2], T. Fuhrmann-Lieker[1]

[1] *Physical Chemistry, IBC, University of Kassel, lukas.wolfram@uni-kassel.de*
[2] *Technological Physics, INA, University of Kassel*

Surface structures like those from a lotus plant are well known for their macroscopic behaviour of a water repellent. Less common are the so-called wrinkle structure as surface modification in use of optics [1,2] and mechanics [3]. This talk will give a short introduction to those structures and how to prepare them in the Lab. The focus of this talk is set to the structural analysis of wrinkles since they can appear in a wide range of morphologies. [4,5,6]

Generating structures with the given model offers two possibilities. First, methods for profile characterization can be tuned and tested on well-defined structures with a given degree of structural order. As a second step, the structural order and morphologies will be linked to the optical properties of the wrinkled structures and their ability to show random lasing. [1,2] The talk will mostly cover the first step and gives a short preview for the connection with random lasing as following projects.

Citations:
[1] Hoinka, N.M., et. al, *Sci Rep, vol* 10, 2434, 2020
[2] Hoinka, N.M., *Dissertation*, 2020
[3] Edwin P.C. et. al., *Soft Matter*,5, 4638-4641, 2009
[4] Gruner et al., *ChemPhysChem*, vol. 14, 2013
[5] Bowden et al., *Nature*, 393, 1998
[6] Ohzono et al., *Soft Matter*, 1, 2005

СЕКЦИЯ ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ

Баян Карапенчев, ФХФ – СУ

Поля Колева, ФХФ – СУ

Стоян Граматиков, ФХФ – СУ

Вероника Петкова, ФХФ – СУ

Илия Кичев, ФХФ – СУ

Владислава Петкова, ИОМТ – БАН

КВАНТОВОХИМИЧНО МОДЕЛИРАНЕ НА НИТРАТНИ ЧАСТИЦИ, АДСОРБИРАНИ ВЪРХУ CeO_2(110) И CeO_2(100) ПОВЪРХНОСТИ

Баян Карапенчев, Искра Колева, Християн Александров

Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучер 1, 1164 София, avatar_ba@abv.bg
Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките, 1113 София

Отпадните азотни оксиди имат негативно въздействие върху околната среда, като има различни регулации, целящи намаляването на отделяното им количество. Това може да бъде постигнато чрез селективна каталитична редукция, използвана и в дизеловите автомобили, където азотните оксиди могат да се редуцират върху повърхността на катализатор до безвредните азот и вода. Често тези катализатори са на основата на V_2O_5 и изискват температури над 300 ºC. Това улеснява деактивирането им от други примеси, а и обичайно желаната работна температура е под 150 ºC. Затова катализатори на основата на CeO_2 се изследват като алтернативи. Нитратите са едни от потенциалните интермедиати в механизма на редукцията на NO_x, което налага детайлното изучаване на различните нитратни частици върху каталитичните повърхности. В предходно изследване на нитрати върху най-стабилната CeO_2(111) повърхност е използвана комбинация от ИЧ спектроскопия и квантовохимични пресмятания, което е позволило определянето на типовете формирани нитрати [1]. Установено е, че в някои видове образци от CeO_2 следващите две най-стабилни повърхности, (110) и (100), са много по-застъпени, като при тях регистрираните честоти на нитратните частици са различни от тези при CeO_2(111) повърхността. В настоящото теоретично изследване проведохме периодични изчисления, базирани на теорията на функционала на плътността с функционал PW91 и параметър за локалното Кулоново отблъскване U = 4 eV за 4f нивата на Ce. Определихме възможни структури на нитрати върху тези две повърхности, тяхната относителна стабилност и честотите на трептенията им. Изследвахме и влиянието на разстоянието между нитратните частици на повърхността върху стабилността и свойствата им.

Изследването е финансирано от проект КП-06-ДВ-16 (ВИХРЕН) и от Европейския съюз-NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект No BG-RRP-2.004-0008. Изчислителните ресурси за проведените квантовохимични изчисления бяха осигурени от проект No BG05M2OP001-1.001-0008 („Национален център по мехатроника и чисти технологии“).

Цитати:
1. Mihaylov M, Zdravkova V, Ivanova E, Aleksandrov H, Petkov P, Vayssilov G, Hadjiivanov K, 2020, ‘Infrared spectra of surface nitrates: Revision of the current options based on the case study of ceria’, *Journal of Catalysis*, vol. 394, pp. 245-258.

КВАНТОВОХИМИЧНО МОДЕЛИРАНЕ НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕТО НА ВЪГЛЕРОДЕН ОКСИД С НАНОЧАСТИЦИ НА ПРЕХОДНИ МЕТАЛИ

Поля Колева, Искра Колева, Християн Александров

Факултет по химия и фармация, Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучър“, 1164 София, e-mail: polqkoleva2911@gmail.com

Голяма част от преходните метали (Ni, Cu, Ag, Au, Pt, Pd, Rh и Ir) намират приложение в много области на човешката дейност, като например нанотехнологиите и хетерогенния катализ. Pd, Pt и Au са предпочитани катализатори за окисление на токсичния за човешкото здраве въглероден оксид до въглероден диоксид. Тази реакция е и ключова стъпка в много индустриални процеси, като селективно окисление на примеси от CO във водород (PROX), конверсия на CO с водна пара (WGSR), обезвреждане на отработените газове отделяни от двигателите с вътрешно горене, риформинг на алкохоли и процеса на Фишер-Тропш [1]. Въглеродният оксид се използва и като молекула сонда в инфрачервената спектроскопия за охарактеризиране на различни каталитични образци и изясняване на степента на окисление и координационната наситеност на металните центрове в тях [2].

С помощта на периодични квантовохимични изчисления бе изследвана адсорбцията на молекула въглероден оксид върху наночастици, състоящи се от 79 атома, на преходните метали Ni, Cu, Ag, Au, Pt, Pd, Rh и Ir. Бяха определени енергетично най-стабилните позиции за адсорбция. Природата на свързване на адсорбата към металните центрове бе анализирана с помощта на промяната в честотата на валентното му трептене след координиране към наночастиците спрямо тази в газова фаза. Разгледано бе и взаимодействието на CO към биметални наночастици, при които един от атомите е заместен с атом на друг преходен метал, като например $Rh_{78}Pt$, $Ag_{78}Pt$, $Ni_{78}Pt$ и др.

Квантовохимичното моделиране бе осъществено с програмен пакет VASP, обменно-корелационен функционал PW91 и базис от плоски вълни с енергетичен праг 415 eV.

Благодарности: Изследването е финансирано от Европейския съюз-NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект No BG-RRP-2.004-0008. Изчислителните ресурси за проведените квантовохимични изчисления бяха осигурени от проект No BG05M2OP001-1.001-0008 („Национален център по мехатроника и чисти технологии“).

Цитати:
1. I. Z. Koleva, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, ACS Catal. 2023, 13, 8, 5358–5374.
2. K. I. Hadjiivanov and G. N. Vayssilov, Adv. Catal. 47 (2002) 307–511.

КВАНТОВОХИМИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА ЗЕОЛИТ С РЕШЕТКА ТИП RHO

Стоян Граматиков, Петко Петков и Георги Вайсилов

СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по Химия и Фармация,
Катедра Органична химия и фармакогнозия, sgramatikov@chem.uni-sofia.bg

През последните години са разработени различни методи за синтез на наноразмерни зеолити. Един от тях включва използването на метални катиони като структуро-насочващи агенти. Видът и размерът на металните йони могат да бъдат определящи за формирането на порестите структури. Пример за зависимостта между размера на катиона и вида на зеолитната решетка е зеолитът RHO, който се получава единствено в присъствието на цезий.

В съответствие с експериментални данни[1,2] за структурата на RHO зеолита са направени 5 периодични модела с обща формула - $Na_xCs_{14-x}Si_{34}Al_{14}O_{96}$. Моделите имат еднакъв параметър на кубичната елементарна клетка, идентично разпределение на Al центрове и се различават единствено по броя и позициите на натриевите и цезиевите катиони. Чрез квантовохимични изчисления и ab initio молекулна динамика е изследвано влиянието на броя на цезиевите йони върху размера на елементарната клетката и промяната в симетричната група на RHO зеолита. Към някои от моделите са добавени молекули вода и CO_2 и поведението на системите е симулирано при различни температури.

Резултатите от теоретичното изследване потвърждават гъвкавата природа на RHO зеолита. С нарастване на броя на цезиевите йони нараства и размера на клетката на алумосиликата. При „повишаване на температурата“ се наблюдава корелация между промяната в симетричната група на системата и промяната в размера на елементарната клетка.

Цитати:

1. Grand, J., Barrier, N., Debost, M., Clatworthy, E. B., Laine, F., Boullay, P., Nesterenko, N., Dath, J., Gilson, J. & Mintova, S. Flexible Template-Free RHO Nanosized Zeolite for Selective CO2 Adsorption. Chem. Mater. 32, 5985–5993 (2020).

2. Confalonieri, G., Grand, J., Arletti, R., Barrier, N. & Mintova, S. CO2 adsorption in nanosized RHO zeolites with different chemical compositions and crystallite sizes. Microporous and Mesoporous Materials 306, 110394 (2020).

МОДЕЛИРАНЕ НА ФРАГМЕНТИ ОТ НЕГРАФИТИЗИРАН ВЪГЛЕРОД КАТО АНОДЕН МАТЕРИАЛ В Na-ЙОННИ БАТЕРИИ

Вероника Петкова, Христо Рашеев

Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра Физикохимия, Лаборатория по квантова и изчислителна химия, София 1164, бул. "Джеймс Баучер" №1, veronikapetkova00@gmail.com

Бързите темпове на развитие на съвременните технологии изискват своевременно подобряване на ефективността, цената и безопасността на използваните материали. Това с пълна сила важи и за батериите. Безспорният пазарен фаворит в момента са литиевойонните батерии (ЛЙБ), но наред с неоспорими предимства, те имат и редица недостатъци. Една перспективна алтернатива са натриевойонните батерии (НЙБ), тъй като са по-евтини и по-безопасни. Промяната на токопренасящия йон обаче налага търсене на нови електродни материали. По-конкретно, графитът, като традиционен аноден материал, е неподходящ за НЙБ. За да се ограничат максимално промените в утвърдените при ЛЙБ производствени технологии, естествено е да се търсят анодни материали с най-близки до графита характеристики, но все пак подходящи за НЙБ. Един такъв материал е неграфитизираният въглерод, който се получава най-често от биомаса и е с пореста структура, осигуряваща възможност за миграция на натриевите йони. Въпросният материал има ненапълно дефинирана структура, която зависи от суровината, от която е получен, но за да не графитизира и същевременно да има задоволителна проводимост, със сигурност съдържа непланарни спрегнати участъци.

В рамките на настоящото изследване е разгледана възможността за прилагането на някои типове полициклични спрегнати непланарни въглеводороди и техни производни като модели на твърд въглерод в потенциални анодни материали. Чрез Теорията на функционала на плътността е оценена промяната в енергетиката и електронните характеристики на моделните системи при взаимодействието им с натрий и са пресметнати електрохимичният им потенциал и капацитет. Получените резултати очертават непланарните полициклични въглеводороди като подходящи кандидати за електродни материали.

*Изследването е финансирано по договор № 80-10-84/26.04.2023 към ФНИ на СУ и е част от мащабния проект „**Био-въглеродни материали: обратимо взаимодействие на натрий с неподредени структури**“ по договор КП-06-ПН-69/9 от 15.12.2022.*

SINGLETBRIDGE – ПРОГРАМА ЗА ГЕНЕРИРАНЕ НА НОВИ ВЪТРЕШНОМОЛЕКУЛНИ ХРОМОФОРИ ЗА СИНГЛЕТНО РАЗЦЕПВАНЕ

Илия Кичев, Любен Бориславов, Юлия Романова

Факултет по химия и фармация, Софийски университет Св. Климент Охридски, Катедра по физикохимия, бул. Джеймс Баучер 1, 1164 София, България,
fhjr@chem.uni-sofia.bg

Синглетното разцепване е процес, при който един високоенергиен синглетен екситон се разделя на два нискоенергийни триплетни екситона [1]. Материалите, които могат да участват в синглетно разцепване, се смятат за потенциално революционни в производството на електричество от слънчева енергия и могат да се окажат ключов фактор в прогреса към зелените технологии. Въпреки това са известни относително малък брой такива материали. Това е и причината при търсенето на нови материали за синглетно разцепване да се използва молекулния дизайн.

В общия случай процесът на синглетно разцепване е бимолекулен (междумолекулен) и следователно е наблюдаван в кристална фаза. За да бъде наблюдаван в разтвор, са предложени вътрешномолекулни хромофори за синглетно разцепване, в които два вече познати хромофора с такива свойства са свързани с молекулен мост [2]. Демонстрирано е, че видът на моста е от ключово значение за оптималния пренос на енергия между хромофорите и може да повлияе значително ефективността на процеса.

Нашата работа цели разработването на програма, която може да генерира вътрешномолекулни съединения за синглетно разцепване. Програмата, наречена SıngletBrıdge, създава нови структури като комбинира два хромофора с потенциал за синглетно разцепване и различни молекулни мостове. Новогенерираните структури включват всички възможни изомери за дадена комбинация хромофор-мост, които в последствие могат да бъдат използвани в стандартните квантовохимични изчисления. SingletBridge е отворена програма, базирана на химичната библиотека RDKit [3] и има потребителски интерфейс, базиран на Qt [4].

1. Smith, Millicent B., and Josef Michl. "Singlet fission." Chemical reviews 110, no. 11 (2010): 6891-6936.
2. Ito, Soichi, Takanori Nagami, and Masayoshi Nakano. "Design principles of electronic couplings for intramolecular singlet fission in covalently-linked systems." The Journal of Physical Chemistry A 120, no. 31 (2016): 6236-6241.
3. Landrum, Greg. "RDKit: A software suite for cheminformatics, computational chemistry, and predictive modeling." *Greg Landrum* 8 (2013).
4. Qt Group. “Qt 6”, April, 2023, https://www.qt.io/product/qt6

ТЕОРЕТИЧНО МОДЕЛИРАНЕ НА КОМПЛЕКСИ НА МАСТНОРАЗТВОРИМИ ВИТАМИНИ С β-ЦИКЛОДЕКСТРИН

Владислава Петкова[1], Валя Николова[2], Силвия Ангелова[1]

[1] *Институт по оптични материали и технологии „Акад. Й. Малиновски", Българска академия на науките, 1113 София, България, vpetkova@iomt.bas.bg, sea@iomt.bas.bg*

[2] *Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски", 1164 София, България, ohtvd@chem.uni-sofia.bg*

Един от основните проблеми в съвременното общество е свързан с неправилното и недостатъчно хранене, в резултат на което се развиват различни заболявания, чието лечение изисква допълнителен прием на витамини под формата на хранителни добавки. Витамините са нискомолекулни органични вещества, необходими в минимални количества за нормалната жизнена дейност в живите организми. Потребностите от витамини са по-големи при бременност, кърмене, интензивна физическа и умствена работа, и инфекциозни болести. Витамините А, Д, Е и К са мастно разтворими и трябва да се приемат по време на хранене, за да се подпомогне тяхното усвояване. Те имат важна биологична активност, но приложението им е ограничено поради ниската им разтворимост и стабилност. Дефицитът на тези витамини се проявява едва след няколко седмици или месеци, тъй като тялото първо използва натрупаните запаси и едва след това настъпва дефицит. Един от начините за подобряване на свойствата на мастноразтворимите витамини е включването им в молекули-домакини, като най-често използваните молекули-домакини във фармацевтичната промишленост са циклодекстрините.

За целите на настоящото теоретично изследване са моделирани комплекси на мастноразтворимите витамини А, Д, Е и К с β-циклодекстрин при стехиометрия 1:1 и е оценено влиянието на различни фактори (ориентация на молекулата-гост в кухината на β-циклодекстрин, влияние на разтворителя, и др.) върху термодинамиката на взаимодействията на молекулата-гост с молекулата-домакин.

СЕКЦИЯ АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ

Катерина Михайлова, НБУ

Ава Амидеина, ПМФ – ЮЗУ

Николай Петков, ФХФ – СУ

Николай Даскалов, ФХФ – СУ

ПРИЛОЖЕНИЕ НА ХИМИЧНИ МЕТОДИ С ВЪЗМОЖНОСТ ЗА ОСЪЩЕСТВЯВАНЕ НА КОНСЕРВАЦИОННО-РЕСТАВРАЦИОННИ ДЕЙНОСТИ

Катерина Михайлова[1,3], Биляна Костова[1], Боян Думанов[2]

[1] *Нов български университет, департамент "Природни науки", "бул. Монтевидео" № 21, София България, kate.wess17@gmail.com, bkostova@nbu.bg*
[2] *Нов български университет, департамент "Археология", "бул. Монтевидео" № 21, София България, bdumanov@nbu.bg*
[3] *Институт по минералогия и кристалография "Акад. Иван Костов" – Българска академия на науките, ул. "Акад. Георги Бончев" 107, София, България*

Археологическата химия е интердисциплинарна наука, свързана с изследването на археологически артефакти и суровината за тяхното производство чрез приложението на комплекс от аналитични методи. Изследванията предоставят нова информация относно технологията на производство на артефактите, чрез която се получават нови данни за древната материална култура и околна среда. Строителната и битова керамика, произведена от глина, се счита за първият композитен материал. Благодарение на широкото производство през вековете и нейната устойчивост във времето, тя е един от най-често срещаните археологически артефакти.

Изследвана е строителна и битова керамика от Римската епоха и Късната античност, чрез комбинация от рентгенофлуоресцентен и термични анализи, подкрепени от прахова рентгенова дифракция и инфрачервена спектроскопия. Чрез оцветяването на керамиката са определени два начина на нейното изпичане – продължителен времеви период за изпичане (равномерен червено-оранжев цвят на керамиката) и кратък период на изпичане (неравномерен цвят – черна вътрешност и червено-оранжева повърхност). Установени са три температурни интервала на изпичане – до 500°C, между 500°C и 700°C, и между 500°C и температурата на декарбонизация на калцит, както и непостоянни окислително-редукционни условия по време на изпичане (за всички изследвани проби).

Получените резултати са с фундаментална стойност за реконструкцията на древната материална култура и възстановяването на знанията за старите производствени технологии. Те имат и практическа стойност, тъй като могат да бъдат приложени при производството на съвременна керамика, която да се използва при осъществяване на консервационно-реставрационни дейности.

Благодарности: Изследването е финансирано от Фонд "Научни изследвания" на България по договор № КП-06-Н39/9 от 09.12.2019 г.

ВАЛИДИРАНЕ НА КАЛИБРАЦИОНЕН МОДЕЛ. ОЦЕНКА НА РИСКА ПРИ ИЗБОРА НА КАЛИБРАЦИОННА ФУНКЦИЯ

Ава Амидеина*, Айше Джугдан, Петко Манджуков

Югозападен университет „Неофит Рилски“, ПМФ, ул. "Иван Михайлов" 66
2700 Благоевград, България,
**a_amideina@abv.bg*

Калибрирането, като част от аналитичната процедура е критично важна за качеството на получаваните в една лаборатория резултати. В повечето случаи, калибрационната функция е линейна и много често това твърдение се приема, като общо правило. В някои случаи, по обективни причини, тя е нелинейна. Решението, линейна или нелинейна функция да бъде използвана е от критично значение за цялата аналитична процедура. Изборът е особено сложен, в случаите на минимално отклонение от линейността, при които повечето от често използваните статистически тестове не дават еднозначен резултат.

Настоящото изследване е насочено към критериите за определяне вида на калибрационната функция, приложимостта на някои от често прилаганите за целта статистически тестове, както и към оценката на риска и възможните последствия от некоректен избор.

Няколко набора от експериментални данни от калибриране (за които е известно, че калибрационният модел е нелинеен) бяха използвани за целите на изследването. Параметрите за линейната и нелинейната калибрационни функции, както и съответните неопределености на измерване бяха оценени съгласно международните стандарти ISO 8466-1:2021 и ISO 8466-2:2001 (последно потвърден през 2023). Оценка на риска при избора на калибрационен модел беше направена чрез внасяне на контролиран шум с разпределение близко до нормалното и вариращ интензитет към „идеална“ калибрационна функция, получена на базата реални експериментални данни.

Цитати:
1. Danzer, K., & Currie, L. A. (1998). GUIDELINES FOR CALIBRATION IN ANALYTICAL CHEMISTRY. PART 1. FUNDAMENTALS AND SINGLE COMPONENT CALIBRATION. Pure & Applied Chemistry, 70(4), 993-1014.
2. Mandel, J. (1964). The Statistical Analysis of Experimental Data. John Wiley & Sons, Inc.: National Bureau of Standards Washington, D.C.
3. Miller, J. C., & Miller, J. N. (2010). Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry. London, UK: Pearson.

КООРДИНАЦИОННИ СЪЕДИНЕНИЯ НА МОНЕНЗИН С Fe(III) – СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И БИОЛОГИЧНА АКТИВНОСТ

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

Важно място в протичането на биохимичните процеси заемат разнообразни метал-съдържащи белтъци. Функциите, които металопротеините проявяват за поддържане на хомеостазата в живия организъм, могат условно да се разделят на три групи: каталитични, транспортни и сигнални. Те са опосредствани пряко от афинитета на даден метален йон към конкретен тип лиганди съгласно електронната му структура. Замяната или недостатъчното количество на биометалните йони води до съществена промяна в нормалното функциониране на клетките – подобрение в тяхното развитие, ако е налице патология, или физиологични изменения, предизвикващи клетъчна смърт, което е търсен ефект при лечението на онкологични и хематологични заболявания.

Освен чрез пряка намеса в протичането на биологичните процеси, металните йони намират приложение и като комплексообразуватели при формирането на координационни съединения с биологично активни молекули. Получените комплекси могат да притежават значително по-добри характеристики по отношение фармакокинетични показатели и биологична активност в сравнение с изходните лиганди.

Полиетерните йонофори са клас антибиотици, които се използват във ветеринарната практика като средство за терапия на кокцидиоза. Изследванията през последните години разкриват нови насоки за техните биологични свойства – значителна антитуморна активност с възможност за повлияване на туморните стволови клетки. Необходимостта от висока липофилност и електронеутралност на комплексите, за да може да се осъществи трансмембранен транспорт, дава основание да се изследва комплексообразувателната способност на йонофорите с йони от типа M^{n+} ($n \geq 2$). Настоящото изследване е насочено към получаване, структурно и биологично охарактеризиране на три полиядрени Fe(III) комплекса на монензин. Новополучените координационни съединения показват значително повишена антибактериална активност (Грам-положителни микроорганизми) спрямо некоординирания антибиотик.

Благодарности: Изследванията са финансирани от проект на ФНИ (КП-06-Н29-3/2018 г.).

АНАЛИЗ НА ЛЕКАРСТВЕНИ ПРОДУКТИ ОТ АПТЕЧНАТА МРЕЖА, СЪДЪРЖАЩИ ИБУПРОФЕН – ПРОФИЛИ НА ОСВОБОЖДАВАНЕ

Николай Даскалов, Златомила Даскалова, Искра Колева, Христо Цачев

Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски", София, България,
nikolaytdaskalov@gmail.com

Ибупрофен е сред най-често използваните нестероидни противовъзпалителни средства. Като обратим неселективен инхибитор на циклооксигеназните ензими, притежава аналгетично и антипиретично действие, което се дължи на инхибиране на синтезата на простагландини. Лекарствените форми, съдържащи ибупрофен, са разнообразни и широко разпространени на българския фармацевтичен пазар. Това поражда интересът на авторите да анализират профилите на освобождаване на активното вещество от няколко търговски продукта.

Проведен е фармакопеен тест за разтваряне на филмирани таблетки и меки капсули, съдържащи ибупрофен в доза 400 mg, суспензии за перорално приложение, съдържащи ибупрофен в доза 20 mg/ml и дермален пластир пренасящ 200 mg ибупрофен.

Извършеният тест е по методология на американската фармакопея - pH 7.2 фосфатен буфер, Апарат 2 при скорост на въртене 50 оборота за минута, времето за извършване на анализа е 70 мин. Количественото съдържание е проследено чрез UV спектроскопия при 221 nm и изготвяне на калибровъчна права, обхващаща концентрациите от изпитването. Аналитичния метод е валидиран за критерии: точност, линейност и възпроизводимост.

Резултатите от тестовете за освобождаване са представени в табличен и графичен вид, позволявайки определяне на кинетиката на освобождаване на активния ингредиент. Резултатите са представени като кумулативно количество освободен ибупрофен за единица време. Разликите в профилите на освобождаване могат да бъдат разгледани като изява на определен дизайн, целящи оптимизиран ефект за пациента. Тестът за разтваряне дава възможността да се търси *in vitro - in vivo* корелация. Проведени са и други изпитвания за охарактеризирането на лекарствените форми.

Изследването е подкрепено от програмата на МОН „Млади учени и постдокторанти - 2".

СЕКЦИЯ ПОЛИМЕРИ

Стефания Гайдарова, ФХФ – СУ

ЛИПИДНИ НАНОЧАСТИЦИ – ОТ ЛАБОРАТОРИЯТА ДО ПАЦИЕНТА

Стефания Гайдарова, Христо Цачев

Софийски университет „Свети Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, София 1164, бул. Джеймс Баучър 1,
ohtsg@chem.uni-sofia.bg, ohtct@chem.uni-sofia.bg

Хроничният риносинуит е състояние, обусловено от усложнени възпалителни процеси в носната кухина. В патогенезата на заболяването са включени редица фактори, които лимитират клиничните стратегии за лечение[1], а комбинациите от назални деконгестанти и кортикостероиди остават основна линия за терапия на хроничен риносинуит (Allergic Rhinitis and its Impact on Asthma (ARIA) Guidelines). Настоящото изследване се фокусира върху синтезиране на твърди липидни наночастици като лекарстводоставяща система за назално приложение на ксилометазолин и мометазон. Основният недостатък на конвенционалните продукти с подобен състав са множеството дозозависими нежелани лекарствени реакции (НЛР), които са причина за необратимо увреждане на носната лигавица при честа употреба. Липидните наночастици, синтезирани по патентована технология[2], позволяват до 20 пъти намаляване на ефективната еднократна доза, което в допълнение с адхезивния ефект на дисперсиите, осигурява трайно и щадящо облекчаване на симптомите на това заболяване. Ефектът от приложението на формулираните състави е проследен при пациенти с хроничен риносинуит. Изследвани са времето на свободно дишане през носа, секрет, сърбеж, запушване на носа, дразнене и зачервяване на очите. За количествена оценка на симптомите е използвана визуално- аналогова скала. Резултатите показват значително увеличаване на времето за свободно дишане още след първото приложение и напълно облекчаване на проявените симптоми през първия 10 дневен период на приложение. Авторите демонстрират клинична ефективност, остатъчен ефект от най-малко 7 дни, отлична поносимост и отсъствие на НЛР при много ниски дози ксилометазолин и мометазон, включени в иновативните липидни наночастици за назално приложение.

Цитати:
1. Whitney W. Stevens, Robert J. Lee, Robert P. Schleimer, Noam A. Cohen, Chronic rhinosinusitis pathogenesis, Journal of Allergy and Clinical Immunology, Volume 136, Issue 6
2. WO2020053609 and WO2019116062.

СЕКЦИЯ ХИМИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ И ИНЖЕНЕРНА ХИМИЯ

Мартин Пантов, ФХФ – СУ

Александра Тодорова, ФХФ – СУ

Анита Бисерова, ФХФ – СУ

Вяра Йорданова, ФХФ – СУ

Маноела Алексиева, ФХФ – СУ

Диана Ковачева, ФХФ – СУ

Татяна Славова, ФХФ – СУ

Стефани Паскова, ФХФ – СУ

Петър Борисов, ФХФ – СУ

Ана-Мария Гюргинчева, ФХФ – СУ

Ралица Узунова, ФХФ – СУ

Васил Георгиев, ФХФ – СУ

Христо Александров, ФХФ – СУ

Владимир Петков, ФХФ – СУ

Лора Манова, ФХФ – СУ

Поля Иванова, ФХФ – СУ

Теодор Боянов, ФХФ – СУ

Йоана Петрова, ФХФ – СУ

ХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА СТРУКТУРАТА НА РОТАТОРНИ ФАЗИ В СМЕСИ ОТ АЛКАНИ

Мартин Пантов*, 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 *mep@lcpe.uni-sofia.bg

Известно е, че фазовият преход от течно в напълно подредено кристално състояние при алканите, C_n, е съпроводен с преминаване през междинна фаза, наречена ротаторна. Стабилността на ротаторните фази по отношение на температурата се увеличава значително при смесването на въглеводороди с различна дължина на веригата, поради образуването на дефекти в подредената структура [1,2].

Целта на настоящето изследване е да се охарактеризира фазовото поведение на различни еквимоларни смеси от алкани с дължина на веригата между 14 и 20 C-атома. Чрез експерименти с рентгеново разсейване (SAXS/WAXS) със синхотронен източник на лъчение бе получена информация за зависимостта на параметрите на елементарната клетка от температурата и от състава на сместа, $\Delta n = |C_{n1} - C_{n2}|$.

Експерименталните резултати показаха образуване на обща смесена ротаторна фаза за всички изследвани системи, $\Delta n = 1$ до 6. При бинарните системи, в които $\Delta n \geq 4$, наблюдавахме частично фазово разделяне и образуване на домени, състоящи се единствено от един от алканите, но основната фракция от молекулите остана подредена в обща смесена фаза. Фазовото разделяне бе възпрепятствано, когато към бинарната система бе добавен допълнителен компонент с междинна дължина.

Проведените експерименти със смесени емулсионни капки, стабилизирани от различни повърхностно-активни вещества (ПАВ) показаха, че ПАВ има второстепенно влияние спрямо разликата във въглеводородните вериги на алканите в сместа. Въпреки това, ПАВ с по-дълги хидрофобни опашки имаха структуриращ ефект, понижавайки слабо междуплоскостното разстояние, измерено за дадена смес при ниска температура. Такъв ефект не бе наблюдаван при изследване на капки с различен първоначален размер, стабилизирани с едни и същи ПАВ. В този случай се наблюдаваше единствено промяна в температурата, при която настъпва прехода от течна в ротаторна фаза.

Цитати:
1. D. Cholakova, N. Denkov, Adv. Colloid Interface Sci, 2019, 269, 7 – 42
2. Cholakova 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).

РЕОЛОГИЧНО ХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА СВОЙСТВАТА НА ПОЛИКРИСТАЛНИ ЛИПИДИ

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@lcpe.uni-sofia.bg*

Дълговерижните линейни алкани формират ротаторна фаза при охлаждане между изотропното си течно състояние и напълно подреденото кристално. Молекулите в ротаторна фаза са подредени в слоеве, но позицията им не е фиксирана – те могат да се осцилират около надлъжната си ос [1]. Реологичните характеристики на ротаторната фаза зависят от температурата на преохлаждане и от дължината на въглеводородната верига – при подредбата на по-дългите въглеводородни вериги се формират повече структурни дефекти, което води до понижена механична здравина на пробата [2].

Цел на настоящето изследване е да се намери подходящ реологичен модел, описващ поведението на ротаторните фази при деформация. За целта са проведени релаксационни тестове с два дълговерижни линейни алкана - нонадекан ($C_{19}H_{40}$) и октакозан ($C_{28}H_{58}$).

Най-простият модел, способен да опише прецизно получените експериментални резултати, се състои от последователно свързани Максуелов елемент (G_0, μ_0) и два Келвинови елемента ($G_{1,2}$; $\mu_{1,2}$). Този резултат показва, че процесите, протичащи при деформация на пробата, се характеризират с три различни релаксационни времена: $\lambda_i = \mu_i / G_i$. $\lambda_0 \approx 21$ s за $C_{19}H_{40}$ и ≈ 31 s за $C_{28}H_{58}$ описва необратимата дисипация на енергия, свързана с прехлъзването на отделните домени един спрямо друг, докато времената $\lambda_1 \approx 0.3$ s и $\lambda_2 \approx 10$ s са свързани с процеси на реорганизация на молекулите в рамките на един домен. В предишно изследване – избраният реологичен модел е бил успешно приложен при описание на реологичното поведение на двумерни материали с доменна структура [3]. Това показва, че избраният подход е по-общ и би могъл да се приложи за разнообразни материали с доменна/поликристална структура.

[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.
[3] K. Golemanov, S. Tcholakova, N. Denkov, E. Pilan, S. Stoyanov, *Langmuir*, 28 (2012) 12071.

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

ДЕФОРМИРАНЕ НА ТРИГЛИЦЕРИДНИ ЕМУЛСИОННИ КАПКИ ПРИ ОХЛАЖДАНЕ

Анита Бисерова, Диана Чолакова, Славка Чолакова, Николай Денков

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

В предишни изследвания бе показано, че алканови емулсионни капки, стабилизирани с дълговерижни повърхностно-активни вещества (ПАВ) с относително малка хидрофилна глава, се деформират спонтанно при охлаждане. Наблюдавано е образуването на хексагонални, триъгълни и четириъгълни флуидни частици, пръчковидни частици и дори образуването на нишки със субмикронен диаметър. Възможността за възникване на деформации е обяснена с образуването на тънка ротаторна фаза по повърхността на капките [1-3].

Целта на настоящето изследване е да бъде проверена възможността за възникване на спонтанни деформации при охлаждане на триглицеридни емулсионни капки. Съществуват две основни разлики между алканите и триглицеридите: (1) Алканите образуват монослоеве при замръзване, докато триглицеридите образуват бислоеве и (2) Триглицеридите не образуват ротаторни фази, при които молекулите имат известна ротационна свобода, но пък тяхната най-нестабилна полиморфна модификация (α фаза) притежава сходни характеристики, поради което може да се очаква, че подобни деформации биха били възможни.

Експерименталните резултати показаха, че макар и значително по-трудно, деформирането на триглицеридни капки също е възможно. Наблюдаваната еволюционна последователност бе същата като тази, известна за алканите. Деформации се наблюдаваха в системи, стабилизирани с ПАВ с въглеводородна верига с дължина двойно по-дълга от тази, необходима за възникване на деформации при алкановите капки. Най-изразени деформации бяха наблюдавани в системи, при които комбинирахме водоразтворим и маслоразтворим ПАВ. Всички наблюдавани ефекти бяха анализирани и ще бъдат систематично представени в настоящия доклад.

Цитати:
1. N. Denkov, S. Tcholakova, I. Lesov, D. Cholakova, S. Smoukov, *Nature* 528 (2015), 392-395.
2. D. Cholakova et al., *J. Colloid Interface Sci*., 604 (2021) 260-270.
3. D. Cholakova, D. Glushkova, A. Biserova et al., *Colloids Surf. A* 656 (2023) 130374.

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

ВЛИЯНИЕ НА КОЙОНИТЕ ВЪРХУ РЕОЛОГИЯТА НА РАЗТВОРИ НА НАТРИЕВ ДОДЕЦИЛ ЕТЕР СУЛФАТ

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@lcpe.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 молекулите и променят формата на агрегатите в разтвора. Типът мицели определя реологичното поведение на такива разтвори. При йонни ПАВ като натриев додецил етер сулфат (SLES), добавянето на електролит води до образуване на нишковидни мицели, при което вискозитетът на разтвора минава през максимум като функция на концентрацията на солта. Известно е, че типът на противойон (заряд и отношение на заряда към радиус на хидратирания йон) оказва влияние върху позицията и височината на максимума на солевата крива, както за разтворите на SLES [1], така и за техните смеси с цвитерйонен ПАВ (SLES+CAPB) [2].

Целта на настоящото изследване е да се определи ефектът върху реологията на SLES от добавянето на сол с различни койони.

Изследвано беше влиянието на няколко натриеви соли като при всички системи се наблюдаваше образуването на нишковидни мицели, изразено чрез получаване на максимум в солевите криви. След отчитане на индивидуалните коефициенти на активността на противойоните в присъствие на различните изследвани койони, поради различното им дисоциране, резултатите бяха описани с универсална зависимост.

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

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НА КАТИОННИ И НЕЙОННИ ПОВЪРХНОСТНО АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА

Маноела Алексиева, Румяна Станимирова, Красимир Данов, Йордан Петков

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

Катионните повърхностно активни вещества (ПАВ) намират широко приложение в битовата химия и промишлеността, поради добре изразените си антибактериални свойства. В последните години те са обект на засилен интерес, като целта на системните изследвания е да се охарактеризират мицеларните свойства на катионните ПАВ и смесите им с други вещества. Известно е, че антибактериалният ефект на катионните ПАВ се дължи на количеството свободни мономери във формулировките. Важно е да се определи как се повлиява мономерната им концентрация в случая на смесени мицеларни разтвори.

В настоящата работа ние изследваме адсорбционните свойства на диоктил (2C8-DAC) и дидецил (2C10-DAC) диметиламониеви хлориди на междуфазова повърхност разтвор/въздух с цел да анализираме и сравним свойствата им в зависимост от дължината на въглеводородната верига. Изследвахме и смеси на тези две катионни ПАВ с нейонни ПАВ по отношение на повърхностни и обемни свойства. Получените резултати са анализирани с теорията на регулярните разтвори и е определено дали двете повърхностно активни вещества се смесват идеално или се наблюдава синергизъм или антагонизъм между тях. Получените резултати ще бъдат полезни за включването на 2C8-DAC и 2C10-DAC в различни формулировки от практически интерес, така че да се запази антибактериалното действие на катионните ПАВ.

ОМОКРЯНЕ И МОРФОЛОГИЯ НА СЛОЕВЕ ОТ КАТИОННИ И НЕЙОННИ ПАВ ВЪРХУ ТВЪРДИ ПОВЪРХНОСТИ

Диана Ковачева, Вероника Яврукова, Кръстанка Маринова,
Красимир Данов, Йордан Петков

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

През последните години интересът върху вещества с антибактериални свойства нарастна значително. Някои от често използваните такива вещества са катионни по природа като продължава изследването на нови представители с цел допълнително оптимизиране на ефективността и съставите, в които се влагат. За антибактериалното действие е важно веществата да са повърхностно-активни, а за някои от приложенията, като дезинфекция на повърхности в обществени сгради и в домакинството, е важно използваните препарати да се адсорбират на тънки молекулни слоеве.

Целта на изследването ни е да сравним адсорбцията върху твърди повърхности на няколко различни катионни повърхностно-активни вещества (ПАВ) поотделно, и в смес с нейонно ПАВ Tergitol 15-s-7. Сравняваме поведението на диоктил (2C8-DAC) и дидецил (2C10-DAC) диметиламониеви хлориди, както и на 2C10-DAC с дидецил метил полиоксиамониев пропионат (2C10-MEAP), за да анализираме влиянието както на дължината на въглеводородните опашки, така и на хидрофилната част, върху адсорбцията. Отлагаме слоеве от разтвори с различна концентрация на ПАВ (под и над критичната концентрация на мицелообразуване) върху подложки от силициев диоксид. Морфологията и дебелината на слоевете определяме елипсометрично, а омокрянето – чрез измерване на контактен ъгъл на водни капки. Получените резултати убедително демонстрират ролята на отложените ПАВ за омокрянето на повърхността, и влиянието на вида и на концентрацията на ПАВ за получаване на хомогенни слоеве за най-добра антибактериална ефективност.

ПОЧИСТВАНЕ НА ИЗКУСТВЕНА КОЖА: ОПТИЧНО НАБЛЮДЕНИЕ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ

Татяна Славова, Кръстанка Маринова, Румяна Станимирова, Красимир Данов

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

Продуктите за лична хигиена непрекъснато се променят през последните години поради навлизането на нови повърхностно-активни вещества (ПАВ) с биологичен и/или органичен произход. Ефикасността и безопасността са задължителните качества за всяка една нова суровина, която се влага в козметиката. Забраненото тестване върху животни и скъпите изследвания *in vivo* доведоха до интензивно разработване и на различни моделни тестове за ефикасност през последните 10-20 години.

Целта на нашето изследване е системно физико-химично охарактеризиране на моделна кожа VitroSkin®, и прилагането и при тестове на почистващи формулировки.

Проведохме системни наблюдения на омокрянето на моделната кожа от различни масла (рициново, силиконово, и моделен себум) чрез стандартен оптичен метод [1], и определихме повърхностната енергия по няколко процедури [2]. Изчислените стойности на повърхностната енергия на VitroSkin® са много близки до известните в литературата за човешка кожа чрез *in vivo* експерименти [2,3]. При това моделните експерименти успешно имитират ефекта от предварителното хидратиране на кожата водещо до повишаване на повърхностната енергия, особено на полярната част.

Директното наблюдение на отделянето на замърсяванията/маслата в разтвори на анионни, катионни и нейонни ПАВ показа значителни разлики в омокрянето и в кинетиката на отделяне. Получените резултати демонстрират убедително чувствителността на метода и приложимостта му за тестване на ефикасност на нови почистващи вещества и формулировки.

Цитати:
1. V.I. Yavrukova, D.N. Shandurkov, K.G. Marinova, P.A. Kralchevsky, Y.W. Ung, J.T. Petkov, Cleaning ability of mixed solutions of sulfonated fatty acid methyl esters. J. Surfact. Deterg. 2020; 23:617.
2. K. Tsujii, Wetting and Surface Characterization. Ch. 23 in Cosmetic Science and Technology: Theoretical Principles and Applications, Sakamoto, K., Lochhead, R.Y, Maibach, H.I, Yamashita, Y. Eds., Elsevier, 2017.
3. J. Krawczyk, Surface free energy of the human skin and its critical surface tension of wetting in the skin/surfactant aqueous solution/air system. Skin Res. Technol. 2015; 21:214.

РОЛЯ НА РАЗТВОРИТЕЛЯ ВЪРХУ ПОЧИСТВАЩОТО ДЕЙСТВИЕ НА ПОВЪРХНОСТНО-АКТИВНИТЕ ВЕЩЕСТВА

Стефани Паскова, Мила Темелска, Дилек Газолу-Русанова, Славка Чолакова

СУ „Св. Климент Охридски", Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия, бул. „Джеймс Баучер" 1, София 1164,
e-mail: sp@lcpe.uni-sofia.bg

Отделянето на маслени замърсявания от твърди повърхности е един от основните физико-химични процеси при миене и пране. Разтворителите са важна съставка на течните перилни препарати, които могат да повлияват свойствата на повърхностно-активните вещества (ПАВ), спомагат за разтварянето и следователно по-лесното отстраняване на маслени замърсявания.

Целта на настоящото изследване е да изясним влиянието на разтворителите дипропилен гликол бутил етер (BPP), метил лаурат (ML), октандиол (OD) и техните комбинации върху отделянето на течни и твърдо-течни маслени замърсявани от памучни платове в присъствие на смес от анионен и нейонен ПАВ. Резултатите от проведените експерименти показаха, че BPP има висока разтворимост във вода, но не оказва влияние върху вискозитета и измиващата способност на формулировките. ML образува емулсия с изследваните повърхностно-активни вещества, понижава междуфазовото напрежение на граница масло-вода и има най-голям ефект върху отделянето на течни маслени замърсявания. OD повишава вискозитета на формулировките и в комбинация с ML успява да подобри измиването на течното маслено замърсяване.

Ефективността на измиване на твърдо-течно маслено замърсяване като функция от концентрацията на ПАВ преминава през максимум в присъствие на всички изследвани разтворители и техни комбинации. От друга страна, ефективността на почистване на течното маслено замърсяване се подобрява с увеличаване на концентрацията на ПАВ.

ЕСЦИН КАТО НЕЙОНЕН И АНИОНЕН СЪРФАКТАНТ: ЕФЕКТ ОТ КОНЦЕНТРАЦИЯТА НА ЕЛЕКТРОЛИТ И pH ВЪРХУ РЕОЛОГИЯТА И ПОВЪРХНОСТНИТЕ СВОЙСТВА НА РАЗТВОРИ

Петър Борисов, Фатмегюл Мустан, Златина Митринова, Славка Чолакова

Катедра по Инженерна химия и фармацевтично инженерство
Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“
pb@lcpe.uni-sofia.bg

Есцин е екстракт от див кестен и е натурален биосърфактант, наречен сапонин. Молекулата му е амфифилна като хидрофобната част представлява тритерпеноид, а хидрофилната част е от олигозахарозен остатък, който съдържа една карбоксилна група. Водният разтвор на есцин има натурално pH със стойност 3.8 и е нейонно повърхностно активно вещество. При по-висока стойност на pH 4.4, карбоксилната група в захарния остатък се депротонира и придобива отрицателен заряд, което превръща есцина в анионен сърфактант. В настоящата работа е изследвано реологичното и повърхностното поведение на разтвори на този сапонин при 2 различни стойности на pH, при които той е в нейонизирана и йонизирана форма. Изследван е ефектът от различните концентрации на електролит в диапазон от 100 до 1000 mM. При ниското pH = 4 е установено, че есцинът образува агрегати, които повишават вискозитета на разтвора, докато при pH 6 есцинът се разтваря напълно и прави бистри разтвори с нисък вискозитет – сравним с този на водата. Добавянето на електролит не променя реологията на разтворите с нейонизирания есцин, но при pH 6 вискозитетът на разтворите минава през максимум като функция на йонната сила по подобие на синтетичните ПАВ [1, 2]. Повишаването на вискозитета се дължи на образуване на мрежа от агрегати в разтворите, които водят до тяхното помътняване. Вискозните разтвори се характеризират с прагов стрес и еластичност, които също минават през максимум като функция на йонната сила. От друга страна, за пенливостта на разредените разтвори (0.5 wt.% есцин) при двете стойности на pH е установено, че намалява с повишаване на йонната сила и динамичното повърхностно напрежение се повишава. Тези системи с висока реология и натурален състав биха могли да послужат като матрица за козметични продукти.

Цитати:
1. M. Pleines et al. / Journal of Colloid and Interface Science 537 (2019) 682–693
2. Z. Mitrinova et al. / Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 643 (2022) 128746

ПОВЪРХНОСТНИ И ОБЕМНИ СВОЙСТВА НА РАЗТВОРИ НА СМЕСИ ОТ НЕЙОННИ И АНИОННИ ПАВ

Ана-Мария Гюргинчева, Румяна Станимирова, Кръстанка Г. Маринова

Софийски университет "Св. Климент Охридски", Факултет по химия и фармация, Катедра по Инженерна Химия и фармацевтично инженерство, Бул. "Джеймс Баучер" №1, София 1164
E-mail: amg@lcpe.uni-sofia.bg

Повърхностно-активните вещества (ПАВ) са главната съставка на всички детергенти независимо дали се използват в бита, в промишлеността, или за лична хигиена. Практически всички такива продукти съдържат смеси от анионни и нейонни ПАВ, като профила на използваните вещества съществено се променя през последните години. Етоксилираните алкохоли и сулфати все по-малко се използват и на тяхно място се появяват все повече глюкозиди, глюкамиди и др. Линейният алкил бензен сулфонат (ЛАС) продължава да е незаменима съставка на перилни и индустриални детергенти, но той все повече се комбинира с глюкозиди вместо с етоксилирани алкохоли.

В настоящата работа представяме сравнение на повърхностните и обемните свойства на смеси на ЛАС с няколко различни нейонни ПАВ в твърда вода, и сравняваме ефектите от вида на хидрофилната и хидрофобната част.

Експериметално сме измерили изотермите на повърхностно напрежение на използваните вещества и техни смеси при три различни отношения. Определихме критичните концентрации на мицелообразуване (ККМ) и площи на молекула в ККМ. Охарактеризирахме обемните свойства с оптични методи.

Анализираме смесването на различните вещества с теорията на регулярните разтвори и сравняваме получените резултати с обемните свойства. Получената информация ще се използва за разработване на смеси с оптимална пенливост за влагане в нови детергентни формулировки.

КИНЕТИКА НА АДСОРБЦИЯ НА ЛЕТЛИВИ АМФИФИЛИ И ПОСЛЕДВАЩА ДЕСОРБЦИЯ ОТ НАСИТЕНА ВОДНА КАПКА КЪМ ВЪЗДУХА

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@lcpe.uni-sofia.bg

Летливите амфифилни молекули намират много широко практическо приложение в медицината, фармацията, козметиката и битовата химия. Използваните амфифилни молекули (линалол, бензил ацетат, цитронелол, ментол и гераниол) притежават ниска разтворимост във вода, повърхностна активност и ниски стойности на парното си налягане.

Целта на настоящото изследване е да се изучи кинетиката на адсорбция на летливите амфифилни молекули от техни пари към повърхността на водна капка, както и последващата десорбция на молекулите от наситената водна капка към въздуха. Първо, измерено е динамичното повърхностно напрежение чрез метода на максималното налягане в мехурче. Получените резултати са описани чрез подходящ теоретичен модел и са определени адсорбционните параметри. Второ, изследвана е кинетиката на адсорбция на амфифилите върху водна капка. Измерванията са извършени на апарат DSA100R (Krüss GmbH, Germany), използвайки методът на висящата капка. При адсорбцията от парите на летливите амфифилни молекули върху повърхността на водната капка се наблюдава понижаване на повърхностното напрежение с времето [1], което се обяснява с бариерно-дифузионен механизъм. Определени са скоростните адсорбционни константи. След насищане на адсорбционния слой е изследвана десорбцията на амфифилите от наситената водна капка към въздуха. Използван е нов полу-емпиричен подход за сравнение на скоростта на изпарение на амфифилите от капка с наситен воден разтвор.

ЕФЕКТ ОТ ДОБАВЯНЕТО НА ГЛИЦЕРОЛ ВЪРХУ ПЕНЛИВОСТТА И ПЕННАТА СТАБИЛНОСТ

Васил Георгиев, Кръстина Стефанова, Златина Митринова, Славка Чолакова

Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство,
Факултет по химия и фармация, СУ "Св. Климент Охридски"
vg@lcpe.uni-sofia.bg

Пенливостта на разтвори от ПАВ без антипенител, зависи от хидродинамичните условия на пенообразуване и скоростта на адсорбция на ПАВ на междуфазова граница. В изследванията на Petkova et al. [1,2] е показано, че относителната пенливост зависи от динамичните повърхностни покрития по време на пенообразуване. В изследванията на Politova et al. [3] е установено, че антипенителната активност нараства с увеличение на средната площ на молекула в адсорбционен слой.

В настоящата работа изследвахме как добавянето на глицерол влияе върху пенообразуването при различни хидродинамични условия. При някои случай добавяхме смесен силиконов антипенител. Използвахме две нейонни ПАВ – Brij35 и Brij58, едно анионно – SDS и две катиони – DTAB и CTAB.

Добавянето на глицерол в непрекъснатата среда води до промяна на адсорбционните параметри, нарастване на критичната концентрация за мицелообразуване и увеличение на средната площ на молекула в адсорбционния слой. В резултат на това глицеролът намалява пенливостта и увеличава антипенителната активност, когато се използва бърз метод на пенообразуване. Когато пенообразуването се осъществява с бавен метод, основната роля на глицерола е забавяне на изтичането на течност от пяната.

Резултатите в присъствие на глицерол потвърждават универсалните зависимости описани в [1,2], т.е. пенообразуването е по-добро при високи динамични повърхностни покрития.

[1] Petkova, B., Tcholakova, S., Chenkova, M., Golemanov, K., Denkov, N., Thorley, D., Stoyanov, S., Adv. Colloid Interface Sci, 2020, 276, 102084.
[2] Petkova, B., Denkov, Tcholakova, S. Colloids Surf. A, 2021, 626, 127009.
[3] Politova-Brinkova N., Hristova, M., Georgiev, V., Tcholakova, S., Denkov, N., Grandl, M., Achenbach, F. Colloids Surf. A, 2021, 610

Благодарности: *Тази работа е частично финансирана от Altana AG (Wessel, Germany) и частично 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".*

КИНЕТИКА НА РАЗТВАРЯНЕ НА МЕХУРЧЕТА ПОД НАЛЯГАНЕ – РОЛЯ НА НАНОСТРУКТУРАТА НА ДИСПЕРСИЯТА

Иван Лесов, Христо Александров, Божидар Иванов, Джесика Девалоапие, Славка Чолакова

СУ „Св. Климент Охридски“, Катедра по Инженерна химия и фармацевтично инженерство, гр. София 1164, бул. Джеймс Баучер 1, dce@lcpe.uni-sofia.bg

Разтворимостта на газове в дисперсии е от съществено значение за редица процеси, в които дисперсиите се транспортират под високо налягане. Разтворенят газ при високо налягане, образува мехурчета при намаление на налягането, което оказва влияние върху структурния интегритет и свойства на крайните материали.

Целта на настоящето изследване е да се определи влиянието на вискозитета на непрекъснатата среда върху скоростта на разтваряне на газови мехурчета в нея при повишаване на налягането. За целта е конструирана клетка, позволяваща наблюдение на мехурчето при високи налягания. С помощта на високоскоростна камера е определена скоростта на разтваряне на мехурчето в дисперсната среда, като получените експериментални резултати са описани при допускане за дифузионно контролирано разтваряне на газа в средата. В независим експеримент е определена граничната разтворимост на газа в изследваните среди. От получените експериментални данни за кинетиката на разтваряне на газа е изчислен дифузионния коефициент на газовите молекули в непрекъсната среда, който е сравнен с предсказания по уравнението на Стокс-Айнщайн. Показано е, че дифузионните коефициенти определени от скоростта на разтваряне на мехурчетата в серия от силиконови масла имат една и съща стойност независимо от голямата разлика в макроскопските им вискозитети. Подобно поведение е наблюдавано, когато се използва серия от разтвори на повърхностно-активни вещества съдържащи различна концентрация на страничен електролит, който променя вискозитета на разтворите от 10 до 300 000 mPa.s. Получените големи разлики между експериментално определените и теоретично изчислените дифузионни коефициенти са обяснени с различния вискозитет, който усещат газовите молекули при техния транспорт през непрекъсната среда, в сравнение с макроскопско измерения посредством ротационен реометър. Малките газови молекули дифундират през непрекъснатата среда без да усещат наличието на нишковидните мицели или наличието на големи полимерни молекули в случая на силиконовите масла, поради което скоростта на разтваряне на газовите мехурчета не зависи от макроскопския вискозитет на средата, ако между молекулите или агрегатите водещи до нарастване на макроскопксия вискозитет има достатъчно място за преминаване на единични газови молекули.

Благодарности: *Тази работа е частично финансирана от Saint Gobain Research (Aubervilliers, France) и частично 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“.*

СТАБИЛИЗИРАНЕ НА ПРЕСИТЕНИ РАЗТВОРИ НА ГЛИБЕНКЛАМИД С ПОМОЩТА НА ЦЕЛУЛОЗНИ ПОЛИМЕРИ И ЖЛЪЧНИ КИСЕЛИНИ

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

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 [1].

В настоящето проучване, сме изследвали кинетиките на разтваряне на глибенкламид, включен в аморфни твърди дисперсии с различни целулозни полимери (HPC, HPMCAS), приготвени чрез разпръсквателно сушене, както и способността на различни целулозни полимери и жлъчни соли, да стабилизират преситени разтвори на лекарството. Разтварянето на глибенкламид е проследено в рамките на 120 мин в *in vitro* модел, наподобяващ условията в човешкия стомашно-чревен тракт [2].

Всички системи приготвени, чрез разпръсквателно сушене, показват подобрен профил на разтваряне, в сравнение с кристалното вещество, чиято разтворимост след 2 часа в in vitro модела е 4 µg/ml. Най-добрите резултати, са получени с формулировките, съдържащи HPC, като измерените концентрации, след 2 часа надхвърлят 200 µg/ml. По-слабо подобрение е отбелязано при формулировката съдържаща HPMCAS.

При системата, съдържаща чист, аморфен глибенкламид, без полимер, се наблюдава бавно разтваряне и достигане на ниски концентрации на лекарството, поради кристализация. Когато във водната среда, присъстват полимери или жлъчни соли, процесът на кристализация може да бъде инхибиран съществено. Най-силно потискане на кристализацията се наблюдава при добавяне на HPC с ниска молекулна маса, като ефекта е по-изразен, когато полимера е в комбинация с жлъчни соли.

В заключение, включването на глибенкламид в аморфни твърди дисперсии значително подобрява профила му на разтваряне. Кристализацията на лекарството може да бъде инхибирана с помощта на целулозни полимери и жлъчни соли, като най-добър ефект се наблюдава при HPC с ниска молекулна маса.

Литература:

1. H. Konno et al. / European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics 70 (2008) 493–499 495
2. Vinarov et al. / Food funct., 2012, 3, 1206- 1220

Благодарности: *Тази работа е 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".*

РОЛЯ НА НОСИТЕЛИТЕ В ЛИПИДНИ ФОРМУЛИРОВКИ ВЪРХУ СОЛЮБИЛИЗАЦИЯТА НА ФЕНОФИБРАТ В МИЦЕЛИ НА ЖЛЪЧНИ КИСЕЛИНИ

Лора Манова, Лилия Винарова, Славка Чолакова, Захари Винаров

Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство,
Факултет по химия и фармация
СУ "Св. Климент Охридски", бул."Джеймс Баучер"1
lm@lcpe.uni-sofia.bg

Цел: Да се определи ефекта на носителя върху профила на освобождаване на фенофибрат от моделни формулировки в *in vitro* модел на стомашно-чревния тракт.

Материали и методи: Използвани са 12 вида липиди и повърхностно активни вещества. Кинетиката на освобождаване на фенофибрат е изследвана в *in vitro* модел, имитиращ условията в стомаха и тънките черва. За поддържане на pH в чревната фаза е използван бикарбонатен буфер. Концентрацията на солюбилизирания фенофибрат в мицелите на жлъчни киселини е определена чрез високо-ефективна течна хроматография.

Резултати: Установени са три качествено различни профила на освобождаване на фенофибрата. При носители като олеинова киселина, моноолеин, Brij 93, Brij O10 и соев лецитин, солюбилизираният фенофибрат нараства постепенно с течение на времето и достига високи концентрации след 120 мин (≈ 650 ug/mL), поради образуване на смесени мицели от носителя и жлъчните соли с висок солюбилизационен капацитет. За разлика от това, при Tween 60, Tween 20 и Brij O20 се достигат високи концентрации на солюбилизиран фенофибрат при контакта на формулировката с чревната фаза, които постепенно намаляват с течение на времето, което е обяснено с получаването на преситен мицеларен разтвор на фенофибрат при кратки времена и последващото утаяване на лекарството. При носители от трета група (Span 80, Peceol, Lauroglycol FCC и захарен естер OWA 1570), които не образуват смесени мицели с жлъчните киселини концентрациите на фенофибрат са ниски през цялото време на експеримента.

Заключения: Видът на използвания носител влияе силно върху концентрацията на солюбилизиран фенофибрат при условия, наподобяващи тези в стомашно-чревния тракт. Най-високи концентрации на липофилното лекарство бяха измерени при използване на системи, базирани на олеинова киселина и моноолеин.

Изследването е частично финансирано от МОН по национална научна програма „ВИХРЕН-2021", проект 3D-GUT (KP-06-DV-3/15.12.2021).

СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ НА ХИДРОФОБНИ ЛЕКАРСТВЕНИ ВЕЩЕСТВА В МОДЕЛНИ ЧРЕВНИ ТЕЧНОСТИ: ЕФЕКТ ОТ ВИДА НА ЛИПИДИТЕ

Поля Иванова,[1] Лилия Винарова,[1] Теодор Боянов,[1] Кристоф Тистаерт,[2] Ян Бевернаж,[2] Славка Чолакова,[1] Захари Винаров[1]

[1] *Катедра „Инженерна химия и фармацевтично инженерство“, Факултет по химия и фармация, СУ “Св. Климент Охридски”, бул.”Джеймс Баучер”1, pi@lcpe.uni-sofia.bg*

[2] *Janssen Pharmaceutica NV, Beerse, Belgium*

Важен аспект във фармацевтичната индустрия е производството на лекарствен продукт, съчетаващ от една страна висока ефективност, но от друга, и необходимата бионаличност в организма. Солюбилизацията на лекарствени вещества в човешкия храносмилателен тракт е от научен интерес, поради връзката й с чревната резорбция и оралната бионаличност. В същото време, съставът на чревните течности след храна зависи силно от вида на приетата храна, което от своя страна може да промени солюбилизацията на хидрофобни активни вещества.

Целта на изследването е да изясним как химичната структура на липидите в моделни чревни течности влияе върху солюбилизацията на хидрофобни активни вещества. За целта беше изследвана солюбилизацията на – ципроконазол, кетоконазол, прогестерон, 17-хидроксипрогестерон, бифоназол, фенофибрат и тиоконазол в 4 вида моделни чревни течности – (1) без липиди; (2) с наситени (C16:0) липиди; с ненаситени (C18:1) липиди и (4) смес от наситени (C16:0) и ненаситени (C18:1) липиди. Солюбилизацията беше измерена чрез високоефективна течна хроматография,

Резултатите показаха, че най- ниска солюбилизация се измерва в системата без липиди, по-висока в тази с наситени липиди и най-висока - с ненаситени липиди. От друга страна, в средата, съдържаща двата вида липиди, се отчита по-висока или по-ниска концентрация от тази с ненаситени липиди в зависимост от вида на активното вещество. За фенофибрат, бифоназол и ципроконазол тя е по-висока, но за прогестерон, 17-хидроксипрогестерон и кетоконазол е по-ниска. Високата солюбилизация в смеси от наситени и ненаситени липиди най-вероятно се дължи на ко-солюбилизацията на иначе неразтворимите наситени липиди от ненаситените. При някои от активните вещества беше наблюдавано фазово разделяне, при което се отделя богата на акнивно вещество маслена фаза, която е с по-висока плътност от тази на водната среда.

СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ НА ХИДРОФОБНИ ВЕЩЕСТВА В КОЛОИДНИ АГРЕГАТИ В МОДЕЛНИ ЧРЕВНИ ТЕЧНОСТИ

Теодор Боянов[1], Лилия Винарова,[1] Кристоф Тистаерт[2], Ян Бевернаж[2], Славка Чолакова[1], Захари Винаров[1]

[1] *Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, Факултет по химия и фармация, бул. Джеймс Баучер 1, 1164 София, България*

[2] *Янсен – Научна и развойна дейност, Фармацевтични науки, Търнхутсеваг 30, 2340 Беерсе, Белгия*

Разтворимостта на хидрофобни активни вещества е един от двата основни фактора, определящи тяхната орална бионаличност. В чревните течности, хидрофобните вещества се солюбилизират в колоидни агрегати съставени от жлъчни соли, фосфолипиди и др. В литературата е известно, че съществува връзка между коефициента на разпределение октанол-вода (LogP) на веществата и тяхна солюбилизация в мицели на жлъчни соли, но липсват достатъчно данни за солюбилизация в по-сложни смеси, съдържащи фосфолипиди и други липиди от храната.

Целта на настоящото изследване е да бъде изяснена ролята на физикохимичните свойства на активните вещества и солюбилизацията им в моделни чревни течности с по-сложен състав. С помощта на течна хроматография бе измерена (1) солюбилизацията им в моделни чревни течности, (2) разтворимостта им при pH = 5.0 и 6.5 и (3) коефициента им на разпределение октанол-вода при pH = 5.0 и 6.5 ($LogD_{5.0}$ и $LogD_{6.5}$).

Установена е добра корелация между солюбилизацията в чревни течности и LogD, което показва важната роля на липофилността на молекулите на активните вещества и предполага, че хидрофобните взаимодействия са важна част от механизма на солюбилизация в колоидни агрегати, представителни за човешките чревни течности. Тъй като в практиката за подобни корелации често се използват изчислени стойности за разтворимостта и LogD на активните вещества, този подход също беше изследван. Резултатите обаче показаха, че при използване на изчислени стойности, вместо експериментални измервания, получената корелация между LogD и солюбилизацията е много по-слаба ($R^2 < 0.5$), в сравнение с корелацията при използване на експериментални данни ($R^2 \approx 0.8$).

Благодарности: *Тази работа е 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“.*

МЕТОДИ ЗА ЕНКАПСУЛИРАНЕ НА ПРОТЕИН В ПОЛИЕСТЕРАМИДЕН ПОЛИМЕР

Йоана Петрова[1], Владимир Петков[1], Лилия Винарова,[1] Георги Михов,[2] Славка Чолакова[1], Захари Винаров[1]

[1] *Катедра инженерна химия и фармацевтично инженерство, Факултет по химия и фармация, СУ "Св. Климент Охридски", бул."Джеймс Баучер"1, yp@lcpe.uni-sofia.bg*

[2] *DSM Biomedical, the Netherlands*

Увод и цел на изследването: Поради изключително ниската бионаличност на протеинови лекарства при перорално приложение, те обикновено се прилагат парентерално. Един от начините за минимизиране на дискомфорта на пациента е разработването на формулировки с удължено освобождаване, които да доставят протеинови лекарства непрекъснато за дълги периоди от време (седмици или месеци). Целта на настоящото изследване е енкапсулирането на протеинови частици в полимер от групата полиестерамидите с цел получаване на моделна формулировка с удължено освобождаване.

Материали и методи: Изследвано беше енкапсулирането на частици от албумин в полиестерамиден полимер, получен от компанията DSM, чрез три метода: (1) разпръсквателно сушене, (2) емулсионен метод и (3) антисолвент метод. Морфологията на получените формулировки беше изследвана чрез микроскопски методи. Ефективността на енкапсулиране и скоростта на освобожаване на протеина от полимерните формулировки беше определена чрез течна хроматография.

Резултати: Установено беше, че разпръсквателното сушене не води до ефективно енкапсулиране на протеиновите частици в полимерна обвивка, поради бързото (10 мин) и пълно разтваряне на протеина след добавяне на получената формулировка във водна среда. Чрез емулсионния и антисолвент метод успешно бяха получени формулировки с висока степен на енкапсулиране (>90 %) и бавно освобождаване на протеина във водна среда (< 1% след 1 седмица), при излишък на полимер (съотношение 1:10 или 1:5 протеин:полимер). Установено беше, че повишаването на концентрацията на протеин намалява крайния размер на частиците, но намалява ефективността на капсулиране и увеличава скоростта на освобождаване.

Заключение: Успешно беше постигнато енкапсулирането на протеин в полиестерамиден полимер и бяха идентифицирани подходящи подходи за подобряването на ефективността на процеса.

СЕКЦИЯ ФИЗИКОХИМИЯ

Васил Иванов, ФзФ – СУ

Димитър Шандурков, ФХФ – СУ

Трифон Попов, МУ – София

ПРОТОКОЛ ЗА ВАЛИДИРАНЕ НА ОПРОСТЕН МОДЕЛ НА КРИСТАЛИЗАЦИЯ В УСЛОВИЯТА НА ИЗЧЕРПВАЩО СЕ ПРЕСИЩАНЕ

Васил Иванов*, Веселин Тончев

Физически факултет, Софийски Университет „Св. Климент Охридски“
ivanovvasil99@gmail.com

Кристализацията е фазов преход от първи род, който протича с напредване на кристалната стена в неподредената фаза за сметка на пресищането, което не се поддържа постоянно в нашия модел[1]. В него са комбинирани уравнение за запазване на веществото и кинетичен закон и е получено общо уравнение за скоростта на превръщане $d\alpha/dt$. Параметрите в него са размерността на пространството D = 1, 2, 3, порядъкът на растеж g с *канонични* стойности 1 и 2 и времевата скала $\tau_{\mathrm{D}g}$. Получени са аналитични решения за $\alpha_{\mathrm{D}g}(t/\tau_{\mathrm{D}g})$ при $D + g \leq 3$, например $\alpha_{21} = \tanh^2\left(2t/\tau_{21}\right)$, докато в останалите три случая интегрирането стига до израз за $t = \tau_{\mathrm{D}g}\, f(\alpha_{\mathrm{D}g})$ – имплицитна крива за степента на превръщане. Разработена е числена процедура[2] за интегриране на основното уравнение на модела за произволни реални стойности на D и g в посока параметрична индентификация на експериментални данни. Моделът е използван за анализ на публикувани данни за растеж[3,4] и зародишообразуване[5], като е отделено особено внимание на прецизирането на протокола за валидиране. В частност, използвани са инструменти като колапс на данните върху универсална (*master)* крива и построяване на графики в т.нар. Аврами координати[1]. Където е възможно, скалите за обезразмеряване са изследвани нататък с цел получаване на съществено познание за явленията и техните механизми.

(1) Ivanov, V. V.; Tielemann, C.; Avramova, K.; Reinsch, S.; Tonchev, V. Modelling Crystallization: When the Normal Velocity Depends on the Supersaturation. April 24, 2023. https://arxiv.org/abs/2304.12402.
(2)Ivanov, V. Vasilvas99/Sigmoid-Tools: Sigmoid Tools Archive 0.1, 2022. https://doi.org/10.5281/zenodo.7293653.
(3) Min, K.-H.; Sinclair, R.; Park, I.-S.; Kim, S.-T.; Chung, U.-I. Crystallization Behaviour of ALD-Ta2O5 Thin Films: The Application of in-Situ TEM. *Philosophical Magazine* **2005**, *85* (18), 2049–2063. https://doi.org/10.1080/14786430500036546.
(4) Sajkiewicz, P. Kinetics of Crystallisation of Polymers-a Review. *Progress in Rubber Plastics and Recycling Technology* **2002**, *18* (3), 195–215.
(5) Markov, I.; Stoycheva, E. Saturation Nucleus Density in the Electrodeposition of Metals onto Inert Electrodes II. Experimental. *Thin Solid Films* **1976**, *35* (1), 21–35. https://doi.org/10.1016/0040-6090(76)90237-6.

ЛУМИНЕСЦЕНТНИ НАНОКОМПОЗИТНИ МАТЕРИАЛИ: ПОЛУЧАВАНЕ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

Димитър Шандурков, Нина Данчова, Веселин Петров, Стоян Гуцов

Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра „Физикохимия“, e-mail: fhds@chem.uni-sofia.bg

Композитните материали представляват многокомпонентни системи, изградени от поне две различни несмесващи се фази, едната от които, обикновено, служи за матрица, а другата е диспергирана в нея. Комбинацията от вещества с различни физични и химични свойства, позволява да се получат материали с разнообразни и лесни за „настройване“ свойства.

Чрез зол-гелния метод са създадени нови композитни материали с потенциално приложение в оптиката и сензориката на базата на оксидни прахове и наночастици, които да служат като матрица-носител за разнообразни оптично активни вещества. Чрез импрегниране на аерогелни образци са получени композитни материали със състав: SiO_2:[Eu(phen)$_2$](NO$_3$)$_3$, SiO_2:[Tb(phen)$_2$](NO$_3$)$_3$ и SiO_2:C, както и „опакован“ луминесцентен комплекс в кухи силикатни частици, [Tb(phen)$_2$](NO$_3$)$_3$@SiO_2.

Контролът върху хидрофобността на силикатната матрица позволява цвета на луминесценцията и квантовия добив на крайния материал да бъдат настройвани. Изследвани са физикохимичните и оптичните свойства на получените материали и силикатни матрици, някои от които притежават многоцветна емисия. Водните молекули са силен гасител на луминесценцията. Установено е, че композитните материали на база хидрофобна силикатна матрица имат по-висок квантов добив и термична стабилност от такива с хидрофилна матрица [1–3].

Литература:

[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] 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.

[3] T. Zahariev, D. Shandurkov, S. Gutzov, N. Trendafilova, D. Enseling, T. Jüstel, I. Georgieva, Phenanthroline chromophore as efficient antenna for Tb3+ green luminescence: A theoretical study, Dye. Pigment. 185 (2020) 108890.

ПРОТЕИН-МИНЕРАЛНИ КОМПОЗИТНИ ЧАСТИЦИ С АНТИРАКОВО ДЕЙСТВИЕ: МОНТМОРИЛОНИТОВИ НАНОПЛАСТИНКИ С ЕЛЕКТРОСТАТИЧНО АДСОРБИРАН ЦИТОХРОМ *C*

Трифон Т. Попов[1], Светлана Хр. Христова[2], Александър М. Живков[3]

[1] *Медицински факултет, Медицински университет – София, ул. „Здраве“ 2, София, България; popov.trifon@gmail.com*
[2] *Катедра по медицинска физика и биофизика, Медицински университет - София, ул. „Здраве“ 2, София, България; svhristova@medfac.mu-sofia.bg*
[3] *Институт по физикохимия, Българска академия на науките, ул. „акад. Георги Бончев“ 11, София, България; zhivkov_ipc@doctor.bg*

В раковите клетки апоптозата (програмирана клетъчна смърт) е блокирана, но може да бъде инициирана чрез въвеждане на митохондриалния протеин цитохром *c* (cytC), използвайки способността на туморните клетки да фагоцитират колоидни частици със субмикронни размери. Неспособността на нормалните клетки (с изключение на имунните) да фагоцитират ги предпазва от действието на cytC-носещите частици, така се постига селективност. За целта ние използваме минерала монтморилонит (ММ), чиито монопластинки са с дебелина 1 нм, като изолираме такива с размер около 0,5 мкм. С методите на статично и електрично светоразсейване и микроелектрофореза изследваме концентрационната зависимост на електростатичната адсорбция на положително заредените при pH 6 cytC-глобули върху отрицателно заредените ММ монопластинки чрез измерване на инкремента на масата, електрофоретичната подвижност, релаксационното време и др., и определихме съотношението адсорбиран/свободен cytC, концентрацията и размера на cytC-ММ частиците, повърхностната плътност и броя на cytC глобулите, адсорбирани върху една ММ монопластинка и намерихме условия за избягване на агрегацията и получаване на монодисперсна суспензия от cytC-ММ композитни частици. Освен това, тествахме *in vitro* цитотоксичния ефект върху клетъчна култура от рак на дебело черво и намерихме, че разтворът на цитС и суспензията на ММ нямат ефект, но композитните cytC-ММ частиците убиват 97% от раковите клетки след 96-часово въздействие; тази висока цитотоксичност (другите автори имат до 65%) ние постигнахме благодарение на колоидната химия. Интересна находка е, че цитотоксичността зависи логаритмично от концентрацията на cytC-ММ частиците. Нашите in vitro експерименти с клетъчни култури показват, че композитните cytC-ММ частици имат потенциал за клинично приложение при антираковата терапия на повърхностни неоплазми на кожата и храносмилателната система (устна кухина, хранопровод, стомах и дебело черво).

СЕКЦИЯ БИОХИМИЯ

Хашим Хашимов, ФХФ – СУ

Цветомир Кирилов, МУ – София

ПРИЛОЖЕНИЕ НА ФИТОСТЕРОЛИ ПРИ ЛЕЧЕНИЕ И ПРОФИЛАКТИКА НА ТУМОРНИ ЗАБОЛЯВАНИЯ

Хашим Хашимов[1,2], Албена Александрова[2], Борис Кадинов[2], Асен Анастасов[3]

[1] *СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“ 1, 1164 София, България, hhashimov@uni-sofia.bg*
[2] *Институт по невробиология към БАН, ул. "Акад. Георги Бончев", бл.23, София, 1113, България*
[3] *Национална професионална гимназия по ветеринарна медицина „Иван Павлов“, бул. „Св. Патриарх Евтимий“ 23, 6006 Стара Загора, България*

Фитостеролите (ФС) или растителните стероли са структурно подобни на холестерола, които са негови растителни еквиваленти. Оказват влияние на множество биологични процеси и по този начин са биофактори. Класифицират се по структура и биосинтеза, основаващи се на 4-дезметилстеролите. Най-често срещаните фитостероли в човешката диета са β-ситостерол, кампестерол, стигмастерол, Δ5-авенастерол и брасикастерол.

Хранителните фитостероли влияят върху растежа и репликацията на раковите клетки по няколко начина. Разгледани са ефектите на фитостеролите върху четири специфични регулаторни пътя: *церамидния метаболизъм, активиране на чернодробния X-рецептор, прогресия на клетъчния цикъл и апоптоза.*

Различни потенциални противоракови механизми са включително такива, които включват инхибиране на производството на канцерогени, пролиферацията на раковите клетки, инвазията и метастазиране, както и индуциране на прекратяване на клетъчния цикъл и апоптоза, като по този начин предоставят химиопрофилактичен и терапевтичен потенциал за борба с рака.

Цитати:

[1]. Atif B. Awad and Carol S. Fink. Phytosterols as Anticancer Dietary Components: Evidence and Mechanism of Action. *The Journal of Nutrition*, Volume 130, Issue 9, September 2000, Pages 2127–2130

[2]. Bradford, P.G. and Awad, A.B. (2010), Modulation of signal transduction in cancer cells by phytosterols. BioFactors, 36: Volume 241-247

[3]. Lanlan Yuan, Fan Zhang, Shuo Jia, Jianhua Xie, Mingyue Shen. Differences between phytosterols with different structures in regulating cholesterol synthesis, transport and metabolism in Caco-2 cells, Journal of Functional Foods, Volume 65, (2020).

[4]. Blanco-Vaca, Francisco,Cedó, Lídia,Julve, Josep,Phytosterols in Cancer: From Molecular Mechanisms to Preventive and Therapeutic Potentials,Current Medicinal Chemistry, Volume 26, issue 37, pages 6735-6749, year 2019

[5]. Woyengo, T., Ramprasath, V. & Jones, P. Anticancer effects of phytosterols. *Eur J Clin Nutr* **63**, 813–820 (2009).

ПОТЕНЦИАЛЕН ЕФЕКТ НА ИЗПОЛЗВАНИТЕ ДНЕС АНТИДИАБЕТНИ ТЕРАПИИ ВЪРХУ ДИАБЕТНАТА ПОЛИНЕВРОПАТИЯ

Цветомир Кирилов[1], Александрина Иванова[1], Любомир Петров[2], Илиян Богданов[2], Павлина Гатева[1]

[1] *МФ, МУ-София, ул. „Здраве“ №2, 102022@students.mu-sofia.bg*
[2] *МФ, СУ-София, ул. „Козяк“ №1, iliyan_bogdanov94@abv.bg*

Диабетната сензомоторна полиневропатия е едно от сериозните усложнения на захарния диабет, асоциирано със сериозно намаляване качеството на живота при изразена клинична симптоматика, като последната може да варира в зависимост от типа на увредените нерви и да включва съответно сензорни (парестезии, тъпа или пареща болка, намалена чувствителност), моторни (дорзална флексия, мускулна слабост) и/или вегетативни (ортостатична хипотония, повръщане, диария) прояви.

Целта на този систематичен преглед е да се резюмират потенциалните ефекти на най-често използваните днес антидиабетни лекарства за лечение и контрол на диабетната полиневропатия.

Извлякохме информация от Scopus, PubMed и Clinicaltrials.gov, като включихме рандомизирани проучвания върху хора и животни, сравняващи различни медикаменти помежду им или с плацебо, както и различни дозировки и схеми на приложение на препаратите. Качеството на всяка статия се оцени независимо от двама автори.

Събраните данни показват невропротективен и невротрофичен ефект, видим при функционални тестове и патохистологични изследвания, на лекарствените препарати от групите на SGLT2-инхибиторите, GLP1-рецепторните агонисти и DPP4-антагонистите, свързани не само с подобрен гликемичен контрол, но също и с повишена експресия на структурни протеини и растежни фактори, повишена невронална и глиална преживяемост и понижен оксидативен стрес поради изместване на баланса към противовъзпалителни медиатори и ензими. Подобни ефекти се наблюдават и при сулфанилурейните медикаменти и метформина.

Резултатите ни показват значителен положителен ефект върху симптомите на диабетната полиневропатия при животински модели на захарен диабет. Ефектите на медикаментите при хора също са положителни, но липсва достатъчно информация, за да се направят обосновани и пълни изводи.

Благодарност: *Разработката е част от научен проект с договор КП-06-Русия/25 от 2020 към Фонд Научни Изследвания*

СЕКЦИЯ ФИТОХИМИЯ И ФАРМАКОГНОЗИЯ

Вероника Петрова, ХФ – ПУ

Асен Стоянов, ФХФ – СУ

СКРИНИНГ НА ОБЩО ФЕНОЛНО СЪДЪРЖАНИЕ И АНТИОСИДАНТНА АКТИВНОСТ НА БИО ТЮТЮН И ЛЕЧЕБНИ РАСТЕНИЯ ОТ БЪЛГАРИЯ

Л. Стоянова[1], Вероника Петрова[2], Д. Киркова[1], М. Дочева[1], Й. Кочев[1], В. Дурева[1], Й. Стремски[2], С. Статкова-Абегхе[2]

[1] *Институт по тютюна и тютюневите изделия – с. Марково, Пловдив 4000 Селскостопанска академия, desislavaa894@gmail.com*

[2] *Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, stab@uni-plovdiv.bg*

В България се срещат над 3600 растителни вида, а лечебно действие е установено на около 770 вида от тях. Използването на лечебни растения въздейства положително върху човешкото здраве и предпазва от редица заболявания.

Тютюнът (*Nicotiana tabacum L.*) е едногодишно растение от род *Nicotiana*, сем. Картофови (*Solanaceae*). Първите записи за използването на тютюна като лечебно растение датират още от 1492 г. След изолирането на алкалоида никотин от тютюневите листа през 1828 г. и установяване на пристрастяващото му действие, медицинското използване на тютюна се прекратява. Няколко столетия по-късно, научните изследвания се възобновяват и отново се насочват към подробно проучване на биологично активните вещества в тютюна и неговото алтернативно използване в медицината, биоинженерството и биотехнологиите. Био тютюнът е нов промишлен растителен продукт, който се обработва и отглежда на сертифицирани биополета, без да се използват конвенционални препарати за растителна защита. Съдържанието на никотин е значително по-ниско от това в тютюн отгледан при конвенционални условия.

В предишни наши изследвания е докладван полифенолния комплекс, включващ фенолни киселини и флавоноиди, от различни тютюни [1, 2]. Представлява интерес изследването на общото фенолно съдържание в екстракти от био тютюн, получени чрез различни полярни разтворители, и съпоставянето им спрямо други подбрани от нас растения с медицинско приложение – мащерка, глог, полски хвощ, коприва, глухарче. Проведени са изследвания за радикал-улавящата и метал редуциращата способност на получените екстракти.

Благодарности: *Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“, (проект по договор № КП-06-М69/4).*

Цитати:

1. M. Docheva, *Comptes Rendus de L'Academie Bulgare des Sciences*, **2018**, 71(6), Pages 757 – 765;
2. M. Docheva, *Bulgarian Chemical Communications*, **2020**, 52, pp. 149–154.

ПРОГНОСТИЧЕН АНАЛИЗ НА РАСТИТЕЛНИ ВЕЩЕСТВА ОТ ТРАДИЦИОННАТА КИТАЙСКАТА МЕДИЦИНА (ТКМ) ЗА НАЛИЧИЕ НА АФЛАТОКСИНИ

Асен Стоянов, Анели Неделчева

СУ „Св. Климент Охридски", Факултет по химия и фармация, катедра „Органична химия и фармакогнозия", бул. Джеймс Баучер №1, 1164, asenns@uni-sofia.bg

Употребата на растителни вещества (РВ) с цел лечение и подобряване на качеството на живот включва традиционното познание върху лечебните растения, ценено и прилагано в съвременните условия. Използваните РВ трябва да покриват определени стандарти, отговарящи на изискванията за качество, безопасност и ефикасност. Пряко засягащо здравето на човека и обществото е замърсяването на РВ с афлатоксини (АФ): афлатоксин B1, B2, G1, G2.[1] Такива са РВ от ТКМ, които в момента навлизат на българския пазар както като РВ, така и като гранични продукти.[3] Съществуващите методи за анализ на АФ в РВ не могат да осигурят адекватен контрол. Съвременен подход е разработването на методи за прогнозиране на риска, чрез анализ на факторите обуславящи наличие на замърсяване в зависимост от конкретните условия. Цел на настоящето изследване е разработване на прогностичен метод за определяне на потенциално застрашени от замърсяване с АФ групи РВ. Обект на изследване са 68 РВ от ТКМ, които се предлагат на българския пазар. Определена е таксономичната и структурна характеристика на растителния материал (66 растителни вида от 40 семейства и 17 морфологични групи РВ). Определени и групирани са рисковите фактори. От значим риск са РВ, които са с произход от социално слаби страни, с тропически или екваториален произход, съдържащи в себе си високи концентрации на полизахариди и/или мастни киселини. Фактори, създаващи предпоставка за замърсяване с АФ са първичната обработка, приложимите местни стандарти за качество, особеностите при транспорт и съхранение. Направен е обзор на наличната информация относно изследваните РВ и факторите въздействащи върху замърсяването им с АФ, след което е проведен клъстерен анализ (K-means и K-mode). РВ са групирани в зависимост от рискът за замърсяване с АФ.

Цитати:
1. Ph. Eur. 9.0, 01/2008:20818 Determination of Aflatoxin B_1 in Herbal Drugs
2. Pitt J.I., Miller J.D. A concise history of mycotoxin research. *J. Agric. Food. Chem.* 2017, 65:7021–7033.
3. Stoyanov, A., Nedelcheva, A. Traditional Asian medicinal plants as components in food supplements released on the Bulgarian market. *Planta Med*, 2022, 88(15):1557

СЕКЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧНА ХИМИЯ

Мирослав Маринчев, МУ – София

Савина Стоянова, ФХФ – СУ

Стефан Касабов, ИОХЦФ – БАН

АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНОСТ И РАДИКАЛ-УЛАВЯЩ ЕФЕКТ НА ХИДРАЗОНОВИ ПРОИЗВОДНИ НА 5-МЕТОКСИИНДОЛ-2-КАРБОКСИЛНА КИСЕЛИНА

Мирослав Маринчев[1], Надя Христова-Авакумова[1], Неда Анастасова[2], Гергана Владимирова[3], Деница Янчева[2]

[1] *Катедра Медицинска физика и биофизика, Медицински факултет, Медицински университет-София, София, България; miroslav1191@abv.bg*
[2] *Институт по Органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките, София, България; Neda.Anastassova@orgchm.bas.bg*
[3] *Катедра по фармакология, фармакотерапия и токсикология, Фармацевтичен факултет, Медицински университет-София, София, България*

Производните на индол-2-карбоксамид представляват интерес за фармацевтичната химия поради широкия спектър от доказани биологични активности - противоракова активност, невропротективен ефект и антиоксидантни свойства [1]. В настоящото проучване продължихме нашата работа посредством синтеза на серия от 8 нови хидразонови производни, съдържащи остатъци от *o*-, *m*– и *p*- пиридинбензалдехид, както и от разнообразно заместени хидрокси- и метоксибензалдехиди. Беше проследен ефектът на тестваните съединения в *in vitro* спектрофотометрични системи, съдържащи стабилните свободни радикали ABTS и DPPH. Изследван е модулиращият ефект на веществата в условия на желязо или AAPH индуцирана оксидативна увреда на лецитин. Тестваните съединения проявиха различна способност да елиминират споменатите стабилни свободни радикали. Всички хидразони понижиха концентрацията на ABTS радикала в пробите, като стойностите на C-50 варират от 5,77 до 32,26 μM. В DPPH системата беше наблюдавана незначителна до умерена радикал-улавяща активност. Само няколко хидразони успяха да намалят концентрацията на радикала в изследваните проби, но наблюдаваният ефект беше много по-слабо изразен от използвания референт Trolox. В лецитин съдържащата моделна система всички вещества проявяват антиоксидантни свойства. Като цяло и в трите системи хидразоните, съдържащи хидрокси- и метоксибензалдехиди проявяват по-добър антиоксидантен и радикал-улавящ ефект от производните на пиридин.

Благодарности: Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания”, договор КП-06-ПМ59/2.

Цитати: Anastassova, N.; Stefanova, D.; Hristova-Avakumova, N.; Georgieva, I.; Kondeva-Burdina, M.; Rangelov, M.; Todorova, N.; Tzoneva, R.; Yancheva, D. New Indole-3-Propionic Acid and 5-Methoxy-Indole Carboxylic Acid Derived Hydrazone Hybrids as Multifunctional Neuroprotectors. Antioxidants 2023, 12, 977.

ХЕТЕРОЦИКЛЕНИ ГАМА-БУТИРОБЕТАИНИ КАТО ПОТЕНЦИАЛНИ МЕТАБОЛИТНИ МОДУЛАТОРИ – IN VIVO ИЗСЛЕДВАНИЯ

Савина Стоянова[1], Йорданка Глухчева[2], Силвия Стойкова[1,3], Васил Атанасов[1,3], Милен Г. Богданов[1,*]

[1] *Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. Джеймс Баучер №1, *e-mail: mbogdanov@chem.uni-sofia.bg*
[2] *БАН, Институт по експериментална морфология, патология и антропология с музей, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 25*
[3] *ВМА, Катедра "Токсикология", ул. „св. Георги Софийски“ 3*

Синтезирани и охарактеризирани са пет хетероциклени аналози на гама-бутиробетаин (GBB) като потенциални модулатори на бета-окислението на мастни киселини в организма чрез инхибиране на карнитин ацилтрансферазите (CAT).

Инхибиращата способност на получените вещества е оценена посредством *in vitro* изследвания и сравнена с тази на положителните контроли мелдониум (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 милимоларна област (IC50 = 2,24-43,6 mM), като някои от тях са по-активни от положителните стандарти.

С цел установяване на острата и хронична токсичност на най-активните представители от изследваната група, както и оценяване на влиянието им върху нивата на L-карнитин в кръв и органи, глюкоза, общ холестерол, LDL, HDL, триглицериди и чернодробни показатели, са проведени *in vivo* изследвания. Бе установено, че най-активното съединение *in vitro* – 4-(изохинолин-2-ил) бутаноат, не проявява желания ефект *in vivo*. Останалите съединения оказват ефект върху метаболитните процеси – прием в продължение на 14 дни води до намаляване нивата на глюкоза в кръвта, повишаване триглицеридите и общия холестерол, но без промяна на LDL, HDL и функцията на черния дроб. С изключение на най-слабо активното *in vitro* съединение – 4-(пиридин-1-ил) бутаноат, останалите съединения демонстрират ниска токсичност, което показва възможността да бъдат прилагани като агенти за контролиране на метаболитните процеси в човешкия организъм и потенциал за лечение на исхемична болест, диабет и някои видове рак.

СИНТЕЗ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА N-АЛКИЛИРАНИ БЕНЗИМИДАЗОЛОВИ ХИДРАЗОНИ И ИЗСЛЕДВАНЕ НА ЦИТОТОКСИЧНОСТ, НЕВРОПРОТЕКЦИЯ, АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНОСТ И ВЪЗМОЖНОСТ ЗА ПЕРМЕАЦИЯ ПРЕЗ КРЪВНО-МОЗЪЧНАТА БАРИЕРА

Стефан Касабов[1], Неда Анастасова[1], Деница Стефанова[2], Надя Христова-Авакумова[3], Ирина Георгиева[4], Румяна Цонева[4], Деница Янчева[1]

[1] *Институт по органична химия с център по фитохимия, Българска академия на науките, ул. „Акад. Г. Бончев,“ бл.9, 1113 София, skasabov1.vol2@gmail.com*
[2] *Катедра по фармакология и токсикология, Фармацевтичен факултет, Медицински университет – София, България*
[3] *Катедра „Медицинска физика и биофизика“, Медицински факултет, Медицински университет-София, София, България, 1000, София, България*
[4] *Институт по Биофизика и Биомедицинско инженерство, Българска академия на науките, ул. Акад. Г. Бончев, бл. 2,1113, София, България*

Оксидативният стрес има съществена роля в патофизиологията на невродегенеративните заболявания и разработването на потенциални лекарства с антиоксидантни свойства е от съществено значение за забавянето на невродегенеративните процеси. Настоящото изследване е продължение на работата на нашия екип, при която са отличени водещи структури с изявен невропротективен ефект [1]. Синтезирана е нова серия от шест съединения, производни на бензимидаозол-2-пропионовата киселина, съдържащи пропаргилна група. Всички получени структури са доказани чрез ^{1}H, ^{13}C ЯМР и ИЧ спектроскопия. Експерименталните методи в началните изпитвания за фармакологична активност включват изследване на антиоксидантна активност в системи на индуцирана оксидативна увреда на биологично важни молекули, оценка на клетъчната жизненост и оценка на невропротективните ефекти в модел на H_2O_2-индуциран оксидативен стрес върху невробластомна клетъчна линия SH-SY5Y. Възможността за преминаване през КМБ беше оценена чрез оценка на пропускливостта през монослой от микроваскуларни ендотелни bEnd.3 клетки, третирани със съединенията. Резултатите от проучването показват нисък цитотоксичен потенциал на изследваните вещества, статистически значим невропротективен и антиоксидантен ефект в трите изследвани концентрации (1, 10, 50 μM), който е по-силно изразен от този на разагилин и мелатонин, както и възможност за преминаване на КМБ.

Благодарности: Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания”, договор КП-06-ПМ59/2.

1. Anastassova, N., Aluani, D., Kostadinov, A., Rangelov, M., Todorova, N., Hristova-Avakumova et al., Evaluation of the combined activity of benzimidazole arylhydrazones as new anti-Parkinsonian agents: monoamine oxidase-B inhibition, neuroprotection and oxidative stress modulation, *Neural Regen Res,* 2021, 16(11):2299-2309.

СЕКЦИЯ ОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Николай Лазаров, ФХФ – СУ

Пламен Чорбаджиев, ИОХЦФ – БАН

Надежда Бозова, ФХФ – СУ

Едже Сюлейман, ХФ – ПУ

Мария Бъчварова, ХФ – ПУ

Десислава Станишева, ФХФ – СУ

Юлиян Романов, ФХФ – СУ

Константин Константинов, ФХФ – СУ

Ивелина Маджарова, ФХФ – СУ

ПРЕДВИЖДАНЕ СВОЙСТВА НА ЙОННИ ТЕЧНОСТИ ПОСРЕДСТВОМ ПРОСТИ КОРЕЛАЦИИ

Николай Лазаров

Софийски Университет "Св. Климент Охридски", Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“ 1164 ж.к. Лозенец, София, nikolaj.lazarov@abv.bg

Методът на остатъчния обем [Bogdanov and Kantlehner (2009)] използва проста корелация за намирането на плътности на Йонни Течности. Методът се базира на потвърдена корелация между обема на остатъка при Йонната Течност (белязан с β) и редица физико-химични свойства, включително плътността. При използване на разширена база от данни, събрана чрез задълбочен литературен анализ, броят на изчислените плътности на Йонни Течности е значително обогатен и методът на остатъчния обем е приложен за предвиждане на плътности на широк набор от Йонни Течности при различни Температури и Налягания с цел потвърждаване на ефективността и универсалността на метода. На базата на направеният анализ е предложено уравнение, базирано на проста линейна регресия, за изчисляване на плътността на Йонни Течности при различни условия.

Цитати:
1. Bogdanov M. G., c and Kantlehner W., (2009) Simple Prediction of Some Physical Properties of Ionic Liquids: The Residual Volume Approach Z. Naturforsch. 2009, 64b, 215 – 222

ХИМИЧНО ПРОФИЛИРАНЕ НА БЪЛГАРСКИ ТЪРГОВСКИ И ЗАНАЯТЧИЙСКИ БИРИ ЧРЕЗ ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ

Пламен Чорбаджиев[1,2], Десислава Гергинова[1], Светлана Симова[1]

[1] *Институт по органична химия с Център по фитохимия, Българска Академия на Науките, 1113 София, България, plamen.ch.59@gmail.com*
[2] *Химикотехнологичен и металургичен университет, Факултет по химично и системно инженерство 1756 София, България, plamen.ch.59@gmail.com*

Бирата е най-разпространената алкохолна напитка в света. Приготвя се от ечемичен малц, хмел, мая и вода. През 1516 г. херцог Вилхелм IV предлага Райнхайтсгебот – Закон за чистотата на бирата, чиято цел е да ограничи съставките в бирата в Германия и областите на бившата Свещена Римска империя. Предполага се, че производството на тази напитка ще е по-евтино, ако част от ечемичния малц се замени с царевица и ориз. Липсата на достатъчен контрол на качеството върху хранителни продукти и нарастващият брой на нови занаятчийски пивоварни в България водят до потенциална опасност към потребителите на бира, имайки предвид неизвестния състав на напитката.

Целта на това изследване е да се проучат разликите в химичния профил на български търговски и занаятчийски бири. Чрез протонна ЯМР спектроскопия анализирахме бири тип лагер и ейл от различни части на България. Приложихме статистически методи за разграничаване на търговски от крафт бири, както и за групиране в съответните им видове – лагер и ейл – на база на техния химичен състав.

Благодарности: *В тези изследвания е използвано оборудване - pH титратор на Разпределената научна инфраструктура ИНФРАМАТ, част от Националната пътна карта на България за научна инфраструктура, подкрепена финансово от Министерство на образованието и науката. За ЯМР изследванията е използвана апаратура закупена по проект № BG05M2OP001-1.002-0012 „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти“, финансиран от ОП „Наука и образование за интелигентен растеж“ 2014-2020 г., съфинансиран от Европейския съюз чрез Европейския фонд за регионално развитие.*

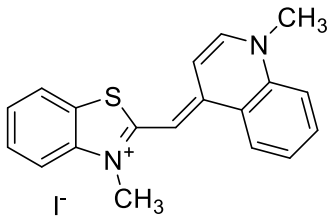
ЦИАНИНОВИ БАГРИЛА ЗА МАРКИРАНЕ НА НУКЛЕИНОВИ КИСЕЛИНИ

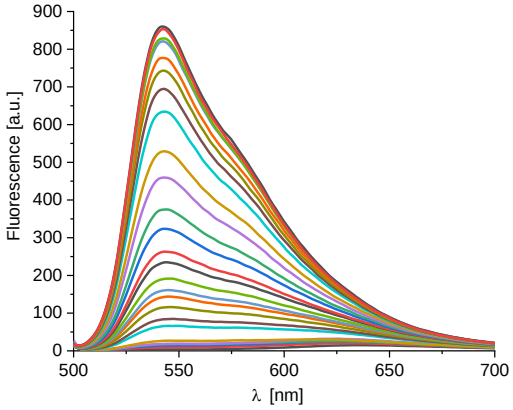
Надежда Бозова, Алексей Василев, Соня Илиева, Диана Чешмеджиева

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра Фармацевтична и приложна органична химия, бул. „Джеймс Баучър“ 1, 1164 София, nadegdabozova@abv.bg

Нарастващият интерес към синтеза и приложението на цианинови багрила се обуславя от отличните им свойства за детекция и визуализация на биообекти. Съвременните приложения на цианиновите багрила се обуславят от възможността за свързване с нуклеинови киселини и използването им като биомаркери. Практически целевите багрила не са флуоресцентни във водни разтвори или притежават незначителна флуоресценция, но стават силно флуоресцентни след контакт с нуклеинови киселини.

Изследвани са фотофизичните свойства на четири цианинови багрила, производни на тиазол оранж (ТО), в свободно състояние и в присъствие на ДНК и РНК чрез UV/Vis и флуоресцентна спектроскопия.





Наблюдава се значително увеличение на интензитета на флуоресценция при свързване с нуклеинови киселини. Проведено е флуоресцентно титруване на багрилата с ДНК и РНК в ТЕ буферен разтвор и са определени съответните константите на свързване.

Получените резултати показват, че багрилата са подходящи за приложение като молекулни сонди за нековалентно маркиране и охарактеризиране на нуклеинови киселини.

СИНТЕЗ И РАДИКАЛ-УЛАВЯЩА АКТИВНОСТ НА БЕНЗОАЗОЛИ СЪДЪРЖАЩИ РЕЗОРЦИНОЛОВ ФРАГМЕНТ

Едже Сюлейман[1], М. Бъчварова[1], Й. Стремски[1], С. Статкова-Абегхе[1], Д. Киркова[2], М. Дочева[2]

[1] *Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, stab@uni-plovdiv.bg*

[2] *Институт по тютюна и тютюневите изделия – с. Марково, Пловдив 4000 Селскостопанска академия, desislavaa894@gmail.com*

Бензоазоловият скелет, съдържащ арилов заместител при C-2 представлява интерес, тъй като влиза в състава на важен клас бициклични привилегировани подструктури с мощна ефективност като фармакологично активни молекули. Широко се използват различни кондензационни методи за синтез на бензазолови производни съдържащи фенолни структури за разработване на нови лекарствени препарати. В по-ранни наши изследвания са докладвани синтезът и антимикробната активност на 2-хидроксифенил бензотиазоли, чрез реакция на амидоалкилиране[1]. Сега докладваме ефективна *in situ* модификация на бензимидазолов пръстен с резорцинол (**Схема 1**).

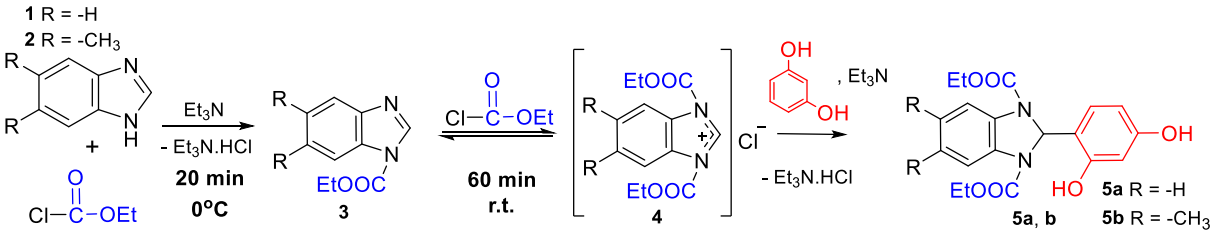


Схема 1. Синтез на 2-(2,4-дихидроксифенил) бензимидазолини.

Изследвана е *in vitro* радикал-улавящата активност на получените четири нови бензотиазолини и бензимидазолини **5a**, **5b**, съдържащи резорцинолов фрагмент, чрез ABTS-метод в сравнение с резорцинол. Бензотиазоловите производни са по-активни от бензимидазоловите. Радикал-улавящата активност на 2-(2,4-дихидроксифенил)-N-карбоксиметил-бензотиазолин е сравнима с тази на резорцинола - IC_{50} 46.3μM.

Благодарности: *Изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на проект № МУПД23-ХФ-003 към Фонд "Научни изследвания" при Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“.*

Цитати:

1. Y. Stremski *Synth. Commun.* **2020**, 50, 3007–3015, https://doi:10.1080/00397911.2020.1791342.

СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНА АКТИВНОСТ НА ХАЛОГЕНИРАНИ КАМАЛЕКСИНИ

Мария Бъчварова[1], Й. Стремски[1], Б. Горанов[2], З. Денкова[2], Ст. Статкова-Абегхе[1], Пл. Ангелов[1], Ил. Иванов[1]

[1] *Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, bychvarova@uni-plovdiv.bg*
[2] *Университет по хранителни технологии, катедра Микробиология, бул. "Марица" 26, Пловдив 4000*

В продължение на наши предходни изследвания и литературни данни за забележителна антивирусна, анти-фитопатогенна и фунгицидна активност камалексинови аналози[1] са синтезирани поредица халогенирани камалексини и е изследвана тяхната антимикробна активност.

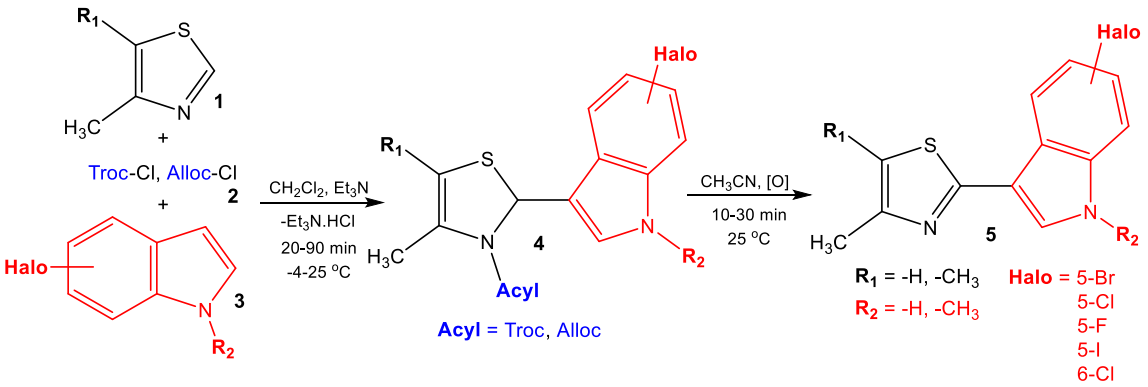


Схема 1. Синтез на халогенирани камалексини

За синтеза на целевите молекули, е приложен лесен двуетапен подход, включващ *α*-амидоалкилиране на бромо-, хлоро-, флуоро- и йодо- индоли **3** с *N*-ацилиминиеви реагенти, получени от метилтиазоли **1** с алкилхлороформиати **2** (**Схема 1**). Установено е, че реакциите протичат успешно с получаването на *N*-ацилирани хало- продукти **4** с високи добиви от 85% до 99%. В следващия етап, те успешно са реароматизирани, чрез окисление с еквивалентно количество *o*-Chloranil или DDQ до получаването халогенирани камалексини **5** с високи добиви в интервала 82% – 98%. Изслседвана е антимикробната активност на някои от получените съединения, с използването на дисково-дифузионен метод на Мюлер-Хинтън агар. Установено е, че хлоро-съдържащите камалексини проявяват по-висока антимикробна активност спрямо бактериите *Bacillus cereus* и *Bacillus subtilis*. Предстои определянето на минималните инхибиторни концентрации (MIC).

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

1. A. Liao, L. Li, T. Wang, A. Lu, Z. Wang, Q. Wang, *J. Agric. Food Chem.*, 70, **2022**, 2554.

СИНТЕЗ НА НОВ КЛАС ФЕНОКСИКАРБОКСИЛНИ И ХИДРОКСАМОВИ КИСЕЛИНИ С ПОТЕНЦИАЛНА РАСТЕЖ-РЕГУЛИРАЩА АКТИВНОСТ

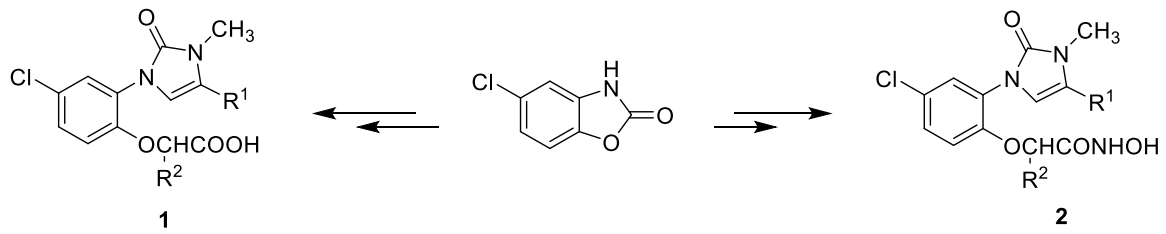
Десислава Станишева, Огнян Петров

СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Фармацевтична и приложна органична химия, София,
бул. Джеймс Баучър 1, София 1164
e-mail: ohtds@chem.uni-sofia.bg

Към днешна дата около 250 растителни вида са източник на проблеми от различно естество в областта на растениевъдството и могат да бъдат класифицирани като плевели. Тези видове намаляват количеството и качеството на посевите, приютяват редица вредители и затрудняват събирането на добивите. Въпреки модерните тенденции за провеждане на органично земеделие и ограничаване на употребата на синтетични торове и средства за защита от вредители, за основната част от селското стопанство, хербицидите остават ценен помощник в борбата с нежеланите растителни видове.

Целта на настоящата работа е синтез и охарактеризиране на нов клас феноксикарбоксилни и хидроксамови киселини с потенциална растеж-регулираща активност.

Избраната от нас синтетична схема се състои от четири стъпки и е базирана на лесно достъпни изходни съединения и меки реакционни условия. Целевите съединения с общи формули **1** и **2** бяха получени с добри добиви, а структурата им беше доказана посредством ЯМР спектроскопия.



Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на Научна програма „Млади учени и постдокторанти “

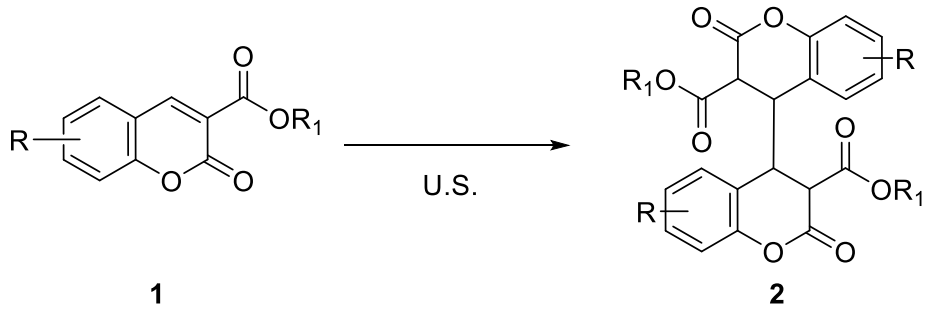
ВЛИЯНИЕ НА РЕАКЦИОННИТЕ УСЛОВИЯ ВЪРХУ ХОДА НА ДИМЕРИЗАЦИЯ ПРИ ЗАМЕСТЕНИ КУМАРИН-3-КАРБОКСИЛАТИ

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_yuliyan@abv.bg

Кумаринът или 2-оксо-2*H*-1-бензопиранът, както и неговите бис-производни, са обект на неотслабващ интерес поради широкото им приложение в различни области на биологията и химията. Този клас съединения са известни с широкоспектърната си биологична активност – различни представители проявяват антикоагулантна, антимикробна, противогъбична, противовъзпалителна, противовирусна, противотуморна, ензимно-инхибираща, анти-HIV и антиоксидантна активност. 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.

Представени са изследвания върху намиране на синтетичен подход за получаване на бискумаринови системи като за изходни съединения се използват заместени кумарин-3-карбоксилати.



R_1 = Et, Me
R = 6-Br; 6-Cl; 6-NO_2; 6-MeO; 7-MeO; 8-MeO; 5,6-CH_2=CH_2-CH_2=CH_2-

R_1 = Et, Me
R = 6-Br; 6-Cl; 6-NO_2; 6-MeO; 8-MeO; 5,6-CH_2=CH_2-CH_2=CH_2-

Авторите изказват благодарности на договор № 2877 НИС при СУ, КП-06-Н39/15 от 17.12.2019г. и проект № 80-10-116 от 27.04.2023г. към СУ „Климент Охридски“.

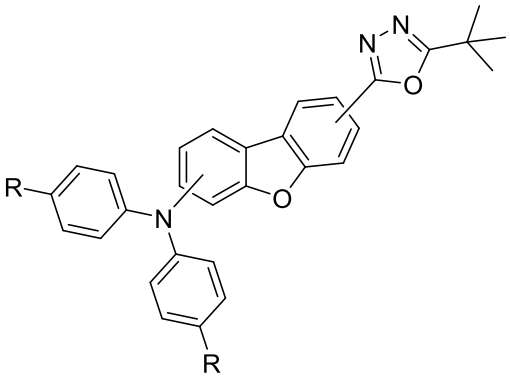
СИНТЕЗ НА ДИБЕНЗОФУРАНОВИ И ИНДОЛОКАРБАЗОЛОВИ ПРОИЗВОДНИ ЗА ПРИЛОЖЕНИЕ КАТО СИНИ ЕМИТЕРИ

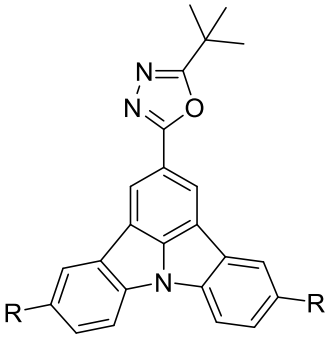
Константин Константинов, Моника Мутовска, Юлиан Загранярски

Факултет по химия и фармация, София 1164, ko.konstantinov@gmail.com

Дизайнът на високо емисионни и стабилни синьо флуоресциращи емитери за органични светодиоди е все още предизвикателство, оправдаващо интензивните проучвания на научната общност в тази сфера. Наскоро, изключително внимание бе обърнато на изработването на емитери, проявяващи т.нар. *TADF* (*Thermally Activated Delayed Fluorescent*) свойства – термично активирана забавена флуоресценция. В тази сфера изключителен интерес се проявява към сините емитери поради ниските квантови добиви и по-сложния дизайн на такива структури, при които оптимизирането на HOMO и LUMO нивата са от съществен принос, за да могат да намерят приложение като сини OLED устройства. За да се реализира TADF процесът, молекулата съдържа най-често пространствено разделени донорен и акцепторен фрагмент.

Нашата група синтезира периода 2020-2022 г. изцяло нови класове сини емитери, базирани на заместени дибензофурани и индолокарбазоли[1]. Всички синтезирани структури показват интензивна флуоресценция в диапазона 410-470nm.





Цитати:
1.Georgia Ivanova, Nadezhda Bozova, Nikolay Petkov, Cunbin An, Benlin Hu, Monika Mutovska, Konstantin Konstantinov, Yulian Zagranyarski, Vladimira Videva, Adelina Yordanova, Martin Baumgarten, Anela Ivanova, *Chemistry–A European Journal*, 2022, vol. 28 (16), e202104411.

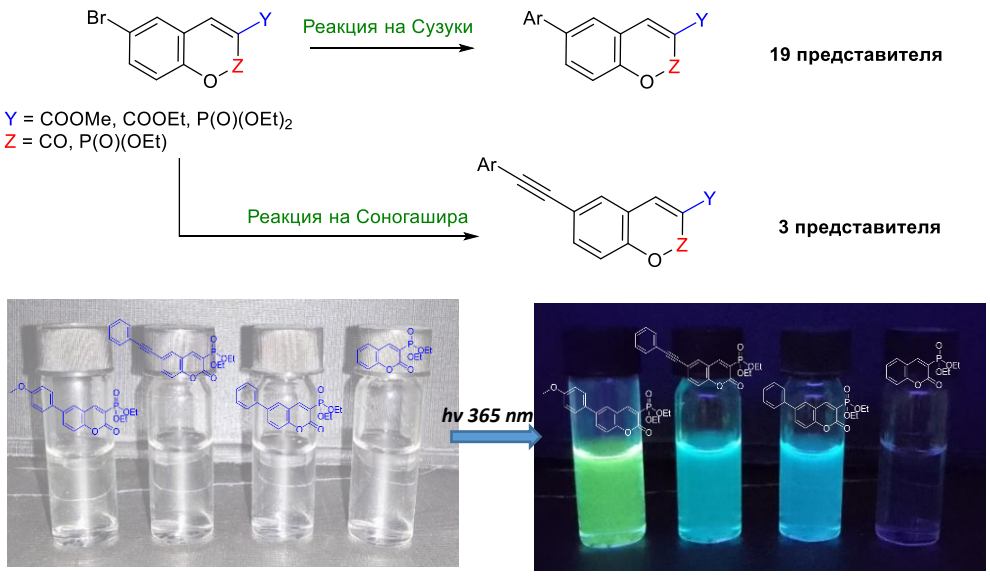
СИНТЕЗ НА ФЛУОРЕСЦЕНТНИ КУМАРИНИ И ФОСФОР-СЪДЪРЖАЩИТЕ ИМ АНАЛОЗИ ЧРЕЗ ПАЛАДИЙ КАТАЛИЗИРАНИ РЕАКЦИИ

Ивелина Маджарова, Р. Ляпчев, А. Колева, И. Колева, К. Симеонова, 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

Кумарините или 2-оксо-2*H*-1-бензопираните са известни с широкоспектърната си биологична активност – различни представители проявяват антикоагулантна, антимикробна, противогъбична, противовъзпалителна, противовирусна, противотуморна, ензимно-инхибираща, анти-HIV и антиоксидантна активност. Друго важно направление в приложението на кумариновите производни са модерните технологии, тъй като кумарини, съдържащи специфични заместители, се използват като отлични луминофори и лазерни багрила. Наличието на спрегната система в тези съединения е най-вероятната причина за електронната транслация във видимата или ултравиолетовата област и определя голямото разнообразие на техните фотохимични свойства, което от своя страна, предопределя тяхната приложимост в различни области на съвременните технологии.

Представените резултати са свързани с получаване на нови кумаринови структури с изразени флуоресцентни свойства чрез 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 № 80-10-116 от 27.04.2023 към СУ „Климент Охридски“.

СЕКЦИЯ КАТАЛИЗ

Евангелия Петрова, ИК - БАН

Мануела Ойкова, ИОХЦФ – БАН

Стефани Петрова, ФХФ – СУ

Павел Николов, ФХФ – СУ

КАТАЛИТИЧНО ХИДРОГЕНИРАНЕ НА РАСТИТЕЛНИ МАСЛА - УНИВЕРСАЛЕН МЕТОД ЗА ПРОИЗВОДСТВО НА ХИДРОГЕНИРАНИ МАЗНИНИ

Евангелия Петрова[1], Димитринка Николова[1], Маргарита Габровска[1], Югослав Кръстич[2]

[1] *Българска академия на науките, Институт по катализ, София 1113, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл.11, evpetrova2020@gmail.com*

[2] *Белградски университет, Институт по химия, технология и металургия, Национален институт на Република Сърбия*

Каталитично хидрогениране на растителни масла е обект на обширни изследвания от много години и продължава да се прилага като един от най-универсалните индустриални методи за получаване на втвърдени масла и мазнини (хидрогенати) с висока стабилност при атмосферни условия. В зависимост от условията на процеса, се различават частично хидрогениране - за хранителни цели и пълно - за технически. Получените хидрогенати се използват в хранително-вкусовата промишленост като суровини за производство на маргарин, мазнини за готвене и пържене, салатни дресинги, втвърдени мазнини за шоколади, бонбони, бисквити, вафли и др. сладкарски изделия, а в техниката - за производството на стеарин, олеин, сапуни и смазочни масла. Най-често използваният катализатор за частично хидрогениране е метален никел (22-25 мас. % Ni), нанесен върху различни източници на SiO_2 - природни (диатомит, бентонит, перлит и др. глини) и синтетични (силикагел, водно стъкло) [1]. Свойството на диспергиран метален никел да катализира присъединяването водород към двойните C=C връзки в ненаситените мастни киселини, а по-късно и към тези в техните триглицериди, е открита от Пол Сабатие (1895-1897), което позволява превръщането им от течно във втвърдено състояние.

Нашата научна група съвместно с Университета в Белград има многогодишна традиция (от 2002 г.-досега) в дизайна и разработването на високо активни, селективни и стабилни никелови катализатори, промотирани с Ag или Pd, и носители природен и синтетичен SiO_2, които биха ограничили образуването на транс-мастни киселини в частично хидрогенираните растителни масла. Известно е, че транс-мастните киселини са нездравословни поради увеличаване на риска от сърдечно-съдови заболявания чрез повишаване концентрациите на общия и LDL холестерол и намаляване на концентрациите на HDL холестерола.

Цитати: 1. M. Stanković, J. Krstić, M. Gabrovska, V. Radonjić, D. Nikolova, D. Lončarević, D. Jovanović, Chapter 8, In Book: New Advances in Hydrogenation Processes – Fundamentals and Applications., **2017**, 48, 131-179. Supported-nickel based Catalysts for Partial Hydrogenation of Edible Oils.

ПОЛУЧАВАНЕ НА ФЕНОЛ ВЪРХУ МОДИФИЦИРАНИ ЙЕРАРХИЧНИ ZSM-5 ЗЕОЛИТИ

Мануела Ойкова[1], М. Попова[1], А. Сегеди[2], Н. Косева[3], П. Шестакова[1], М. Р. Михали [3]

[1] *Институт по Органична Химия с Център по Фитохимия – Българска академия на науките, Manuela.Oykova@orgchm.bas.bg*
[2] *Институт за материалите и химия на околната среда, Будапеща, Унгария*
[3] *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 C5- и C6-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. Процесите на каталитично деметоксилиране и деалкилиране на алкилфеноли в присъствие на бифункционални катализатори водят до селективно получаване на фенол.

В настоящето изследване са получени монометални (Ni, Ru, Pt) и биметални (Ni-Pt, Ru-Pt) йерархични ZSM-5 зеолитни катализатори чрез импрегниране с омокряне. Получените катализатори са изследвани в реакция на хидродеметоксилиране и деалкилиране на 2-метокси-4-пропилфенол и 4-етилфенол в газова фаза. Катализаторите са характеризирани с редица физикохимични методи като прахова ренгенова дифракция, трансмисионна електронна микроскопия, инфрачервена спектроскопия, азотна физисорбция, температурно-програмирана редукция и ядреномагнитна спектроскопия в твърда фаза. Образуването на фино дисперсни никел-, рутений- и платина-оксидни частици, след процедурата по модифициране, са регистрирани върху моно- (Ni, Ru и Pt) и биметалните (Ni-Pt, Ru-Pt) зеолитни катализатори.

Установено е, че йерархичният ZSM-5 зеолит е подходящ носител за получаването на моно- и биметални Ni, Ru и Pt-съдържащи катализатори с висока активност при трансформация на 2-метокси-4-етилфенол и 4-етилфенол във фенол. Установено е също така, че част от никела е включен в решетката на зеолита до йонни позиции чрез прилагания метод на импрегниране. Адитивният ефект на Pt е свързан с увеличаването на металната дисперсия и подобряването на редуцируемостта на NiO. Сред изследваните катализатори 10Ni1Pt/Z-h показва най-висока активност и селективност за производство на фенол, получен от биомаса чрез хидродеметоксилиране на 2-метокси-4-пропилфенол.

Благодарности: М. Ойкова благодари на Министерството на образованието и науката по Националната изследователска програма „Млади учени и докторанти“, одобрена от DCM # 577/17.08.2018.

СИНТЕЗ, ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ И ФОТОРЕДУКЦИОННИ СВОЙСТВА НА ТВЪРДИ РАЗТВОРИ ОТ ТИПА $Tb_{1-x}Ce_xVO_4$

Стефани Петрова, Мартин Цветков, Мария Миланова

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра Неорганична химия, Лаборатория по химия на редкоземните елементи, бул. Джеймс Баучер №1, 1164 София,
email: stefanypetrova02@gmail.com

Cr(VI) е класифициран като най- токсичният метален катион поради силно изразените му мутагенни и канцерогенни свойства [1]. Той често се открива в природни води, тъй като широко се използва в редица индустрии като металургия, обработка на кожи, производство на пигменти. Съществуват редица методи за пречистване на води от Cr(VI), но много от тях са неефективни или водят до генериране на вторични отпадъци. Фотокаталитичната редукция до Cr(III), който има значително по- ниска токсичност, е един от най- перспективните методи за пречистване на води от Cr(VI).

Настоящата работа разглежда синтез и пълното структурно охарактеризиране на твърди разтвори от реда $CeVO_4$-$TbVO_4$, като потенциални фотокатализатори за редукция на Cr(VI). Твърдите разтвори са получени чрез едностъпков хидротермален метод като е избегната пост-синтетичната обработка на получените материали. Образците са охарактеризирани чрез редица физикохимични методи като XRD, SEM, UV-VIS, флуоресцентна спектроскопия за определяне на структурните, морфологичните и оптичните свойства на материалите. Експериментите за фотокаталитична редукция на Cr(VI) във води показва пълна редукция до Cr(III) за по- малко от 40 min при облъчване с видима светлина. Получените резултати показват потенциалното приложение на материалите като ефективни катализатори за пречистване на води от тежки метални йони като Cr(VI). Чрез набор от експерименти в присъствие на различни молекули-гасители е определен механизмът на реакцията, което позволява по-добро разбиране на протичащите процеси.

Цитати:
R.J. Kieber et al., Environ. Sci. Technol. 2002, 36, 24, 5321–5327

ФОТОФИЗИЧНИ И ФОТОКАТАЛИТИЧНИ СВОЙСТВА НА ДОТИРАН С НЕМЕТАЛИ g-C_3N_4

Павел Николов, Мартин Цветков, Мария Миланова

Софийски университет „Св. Климент Охридски“,Факултет по химия и фармация, Катедра Неорганична химия, Лаборатория по химия на редкоземните елементи, бул. Джеймс Баучер №1, 1164 София,
email: pavelnikolov3103@gmail.com

Замърсяването на околната среда е сериозен проблем, пред който е изправено човечеството, като голям замърсител са отпадни води (особено от фармацевтичната и текстилната промишленост). Сред един от най-перспективните методи за пълна минерализация на органични замърсители във води е фотокаталитичното окисление.

Графитоподобният въглероден нитрид (g-C_3N_4) е обещаващ фотокатализатор. Той е полупроводник с ширина на забранената зона около 2.7 eV, което позволява неговото активиране при облъчване с видима светлина. Синтезира се лесно от достъпни и евтини материали като урея и цианамид. Един от сериозните му недостатъци обаче е бързата рекомбинация на фотогенерираните електрон/дупка, широка забранена зона и ниска специфична повърхност. Един от методите за решаване на гореизброените проблеми е чрез дотиране на g-C_3N_4 с други елементи.

В настоящето изследване са разгледани синтеза и свойствата на g-C_3N_4, дотиран с други неметални елементи (като фосфор, сяра, кислород, бор, флуор, хлор). Получените образци са охарактеризирани чрез набор от физикохимични методи като прахова рентгенова дифракция, инфрачервена спектроскопия, UV-VIS спектроскопия, флуоресцентна спектроскопия, сканираща електронна микроскопия, за да се установят структурните, морфологичните и оптичните свойства на получените образци.

Материалите бяха тествани като фотокатализатори за разграждане на органични багрила (в частност Родамин Б) при облъчване с видима светлина. Установено е положителното влияние на някои от дотиращите елементи, което води до двукратно увеличаване на каталитичната активност. Чрез серия от експерименти с участие на радикалови гасители е установен механизмът на реакцията.

Получените резултати показват, че дори и малки количества на дотиращия елемент води до значителна промяна както на физичните, така и на каталитичните свойства на g-C_3N_4, което предоставя платформа за моделиране на желани свойства, чрез подбор на подходящи допанти.

СЕКЦИЯ НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Яна Димитрова, ФХФ – СУ

Елжана Енчева, ФХФ – СУ

Савина Колева, ФХФ – СУ

СЕНЗОРНИ СВОЙСТВА НА ЛАНТАНОИДНИ МЕТАЛ ОРГАНИЧНИ РАМКИ (Ln-MOFs) С ТЕРЕФТАЛОВА КИСЕЛИНА

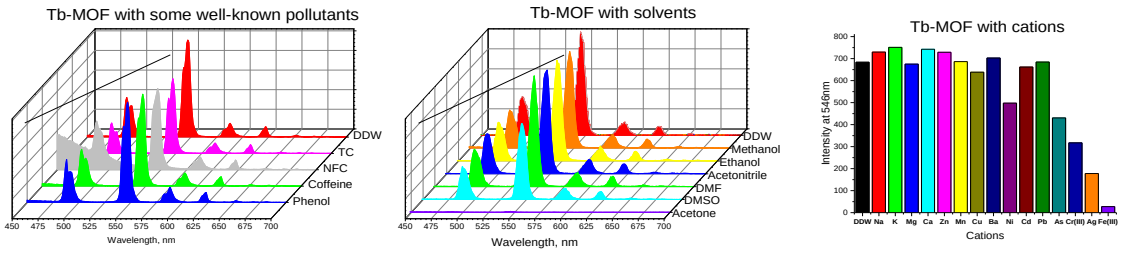
Яна Димитрова, Мартин Цветков, Мария Миланова, Деница Еленкова

СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Неорганична Химия, 1164 София, бул. "Джеймс Баучер" №1, yanadim123@gmail.com

През последните години редица порести материали са изследвани като потенциални сензори [1,2], а през последните 20 години луминисцентните метал-органични рамки привличат значителен интерес поради техните свойства като висока специфична повърхност, способност за регулиране размер на порите, порьозност. Именно порьозността е сериозно предимство на MOFs пред другите луминесцентни сензори, тъй като може да осигури концентриращ ефект, което води до повишена чувствителност на откриване и селективност към анализирания аналит.

Фокус на настоящото изследване са изследване на структурата и сензорните свойства на Ln-MOFs, където Ln = Dy (III), Sm (III), Tb (III) и Eu(III), а линкър терефталова киселина. Използвани са данни от получен монокристал на Dy-MOF със състав отговарящ на $[Dy_2(BDC)_3(H_2O)_4]\infty$ за провеждане на Ривелд анализ.

Чрез метода на флуоресцентното титруване са изследвани сензорните свойства на две от пробите (Eu-MOF и Tb-MOF) спрямо подбрани замърсители на води: органични разтворители, антибиотици и някои катиони (Фиг. 1).



Фиг. 1: Интензитет на флуоресценцията на суспензия на Tb-MOF във вода 0.5mg/ml в присъствието на различни замърсители

***Благодарност**: Авторите изразяват благодарност за финансовата подкрепа на проект **№ КП-06-Н69/6** финансиран от Фонд „Научни изследвания“*

Цитати:
1. L. Yang, Y. Song, L. Wang, *J. Mater. Chem. B*. 8 (2020) 3292–3315.
2. Y.-S. Xue, J. Ding, D.-L. Sun, W.-W. Cheng, X.-R. Chen, X.-C. *Huang*, *CrystEngComm*. 23 (2021) 3.

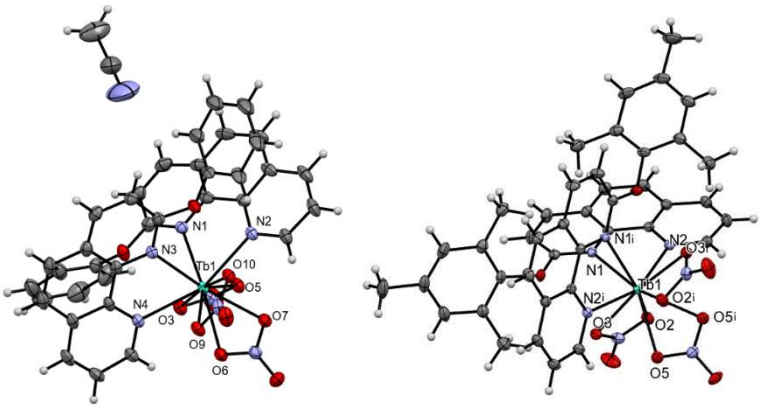
СИНТЕЗ, КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И ЛУМИНЕСЦЕНТНИ СВОЙСТВА НА НОВИ Tb(III) КОМПЛЕКСИ С ПРОИЗВОДНИ НА 1,10-ФЕНАНТРОЛИН

Елжана Енчева, Мартин Цветков, Румен Ляпчев, Йоана Захариева

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра Неорганична химия, Лаборатория по химия на редкоземните елементи, бул. Джеймс Баучер 1, e-mail: eencheva97@gmail.com

В наши дни синтезът и охарактеризирането на нови лантанидни(III) комплекси е изключително актуална тема поради специфичните им фотофизични свойства, които зависят от вида на използвания лиганд – феномен известен като „антена ефект“. Определянето на структурните особености на комплексите и отражението на състава и структурата им върху техните свойства обогатяват научните знания, както и потенциалните области на приложение.

Настоящата работа изследва получаването на два нови Tb(III) комплекса с производни на 1,10-фенантролин. Кристалната структура на получените комплекси е определена чрез монокристална дифракция на изолирани из ацетонитрил кристали. Изследвани са междумолекулните взаимодействия чрез *Hirshfeld* анализ, което позволява да се вникне в начина на групиране на молекулите в кристалната опаковка. Детайлно са изследвани луминесцентните свойства на получените комплекси, като са определени ефектите на кристалната структура и вида на органичния лиганд върху тях. Получените резултати показват, че модифицирането на изследваните лиганда води не само до промяна на фотофизичните свойства на комплексите, но и на тяхната кристална структура.



а б

Молекулни структури на Tb(III) комплекси с а) 2-фенокси-1,10-фенантролин и б) 2-(2,4,6-триметилфенокси)-1,10-фенантролин.

Благодарност: *Авторите изразяват благодарност за финансовата подкрепа на проект № КП-06-Н39/1 от 2019 г., финансиран от Фонд „Научни изследвания“.*

СИНТЕЗ И ЛУМИНЕСЦЕНТНИ СВОЙСТВА НА Eu(III) И Sm(III) КОМПЛЕКСИ С ДИТИОКАРБАМАТНИ И БЕТАДИКЕТОНАТНИ ЛИГАНДИ

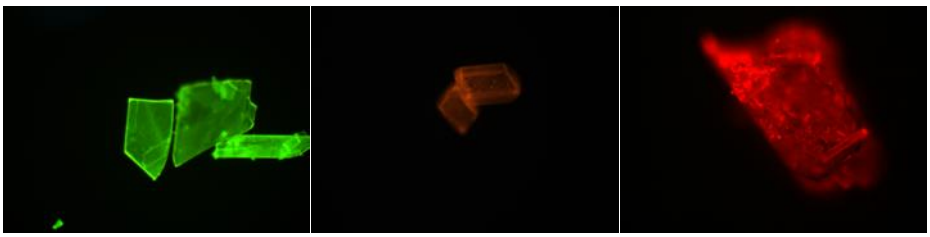
Савина Колева[1], Деница Еленкова[1], Мария Миланова[1], Ивелина Георгиева[2]

[1] *СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Неорганична Химия, 1164 София, бул. "Джеймс Баучер" №1, savi.koleva02@gmail.com*
[2] *Институт по обща и неорганична химия, БАН, 1113 София, ул. „Акад. Г. Бончев“ 11*

Съединенията на базата на лантаноиди се използват широко в разработването на материали с уникални магнитни и оптични свойства [1]. Ln(III)-съдържащите съединения се характеризират с тесни емисионни ивици, както и с по-дълъг живот на емисиите. Основният недостатък, който възпрепятства тяхното приложение, е ниската моларна абсорбция в UV-Vis обхвата на спектъра, което води до относително ниски луминесцентни квантови добиви. Този проблем може да бъде преодолян чрез така наречения „антена ефект“, при който лиганд, абсорбиращ интензивно в UV-Vis областта, може да извърши резонансен трансфер на енергия към Ln(III)-йона [2,3].

Настоящата работа е насочена към синтез на серия от комплекси на Eu(III) и Sm(III) с фенантролин и изследване на влиянието на дитиокарбаматни и бетадикетонатни противойони върху луминесцентните им свойства.

Получените комплекси са охарактеризирани с прахово-дифракционен, ИЧ и ЯМР методи. Проведени са серия от спектрофотометрични изследвания, както върху лигандите, така и върху получените комплекси, с цел да се оцени възможността на лигандите за сензибилизация на Ln(III) луминесценция. Пробите са наблюдавани с флуоресцентен микроскоп (фиг.1)



Фиг. 1: Бетадикетонатен лиганд, Sm(III) комплекс с дитиокарбамат и фенантролин, Eu(III) комплекс с бетадикетонатен лиганд.

***Благодарност**: Авторите изразяват благодарност за финансовата подкрепа на проект PhotoMetalMod, **№ КП-06-Н59/6,** финансиран от Фонд „Научни изследвания“*

Цитати:
1. J. G. Bünzli, Eur. *J. Inorg. Chem.* (2017) 5058.
2. K. Binnemans, *Chem. Rev.* 109 (9) (2009) 4283.
3. J. G. Bünzli, C. Piguet, *Chem. Soc. Rev.* 34 (2005) 1048.

XXI Национална конференция

по химия за студенти и докторанти

17-19 май 2023 г. София

Факултет по химия и фармация
Софийски университет „Св. Климент Охридски"