

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

15-17 май 2024 г. СОФИЯ



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

XXII Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2024

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/scc2024/>

**XXII 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 със съдействието на Факултетен
студентски съвет при ФХФ-СУ, Амрест, Престиж, Florina, Hands and
Friends**

НАУЧЕН СЪВЕТ

проф. Анела Иванова, СУ
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
маг. фарм. Николай Даскалов, СУ
докторант Стоян Граматиков, СУ
студент Поля Колева, СУ
студент Бояна Събчева, СУ
студент Дона Саралиева, СУ
студент Ивана Христова, СУ

XXII Национална конференция по химия за студенти и докторанти
Програма

15 май 2024, 130 аудитория на ФХФ, СУ

- 8:30 9:00 **Регистрация**, пред 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ
- 9:00 10:00 **Откриване, 130 аудитория**, Факултет по химия и фармация на СУ
- Лекция на акад. Константин Хаджииванов**, Институт по обща и неорганична химия, БАН
 „ Ce^{3+} катиони в CeO_2 – мит или реалност?“

Секция „Изчислителна химия“, Заседателна зала на ФХФ, СУ

- 10:20 10:40 Бояна Събчева, И. Колева, Х. Александров
 „Квантовохимично моделиране на взаимодействието на бор с наночастици на преходни метали“
- 10:40 11:00 Стоян Граматиков, П. Петков, Г. Вайсилов
 „Квантовохимично моделиране на влиянието на органични агенти върху германосиликатни зеолити“
- 11:00 11:20 Вероника Петкова, Х. Рашеев
 „Моделиране на Na клъстери в пори на неграфитизиран въглерод“
- 11:20 11:40 Георги Василев, Х. Рашеев, А. Таджер, Р. Стоянова
 „Редокс процеси в електролити за метал-йонни батерии“
- 11:40 12:00 Калина Кръстилова, Х. Рашеев, А. Таджер, С. Ангелова, В. Николова
 „Теоретично изследване на пилар[5]арен като модел на биомембранен воден канал“
- 12:00 13:00 Обедна почивка**
- 13:00 13:20 Чара Бориславова, С. Джумайска, А. Иванова
 „Статистическо моделиране на синглет-триплетното разцепване в сини TADF емитери за OLED“
- 13:20 13:40 Любен Бориславов, Й. Стойчева, А. Таджер, Ю. Романова
 „TD-DFT/TDA подходи, дирадикалов характер и хромофори за синглетно разцепване: неочаквано добра комбинация“
- 13:40 14:00 Едуарда Енчева, С. Илиев, А. Иванова, Е. Милева
 „Теоретично изследване на самоорганизацията на двуантенен олигоглицин в обемна водна фаза“
- 14:00 14:20 Стоян Илиев, С. Цибранска, А. Иванова, Н. Александров, С. Чолакова, Н. Денков
 „Определяне на фази получени от молекулнодинамични симулации на хексадекан-съдържащи системи след замръзване“

- 14:20 14:40 Владислава Петкова, Н. Кирчева, С. Добрев, М. Мутовска, В. Николова, Ю. Загранярски, Т. Дудев, С. Ангелова
„Модели на биомембранни водни канали, базирани на 1,8-нафталиimid: изследване с методите на теория на функционала на плътността“

14:40 15:00 Кафе-пауза

- 15:00 15:20 Никол Иванова, В. Николова, С. Ангелова
„Теоретично изследване на комплекси на уранилов катион с водни молекули на каликсарени“
- 15:20 15:40 Катрин Петкова, Л. Бориславов, А. Таджер, Ю. Романова
„Молекулен конструктор от дирадикалоидни фрагменти – наръчник за дизайн на високоефективни фотоволтаици“

Секция „Физикохимия“

- 15:40 16:00 Иво Лозанов, Л. Лютов
„Конструиране и охарактеризиране на евтин съпротивителен диференциален термометър в интервал 20 - 100°C“
- 16:00 16:20 Филип Маринов, И. Петров, Ц. Лъжовски, П. Темнишки, К. Стоилов, С. Петрова, К. Балашев
„Влияние на йонизиращото лъчение, генерирано от медицински линеен ускорител (LINAC), върху структурата и функциите на ензимите“
- 16:20 16:40 Елица Гълева, В. Иванова-Колчева, R. M. Almeida, Â. F. Santos, M. J. V. Lourenço, C. Nieto de Castro
„1-етил-3-метилимидазолиев октаноат, [C₂MIM][C₇H₁₅COO] – термофизични свойства на смесите му с вода и йонанофлуид с меланин“

16:40 17:00 Кафе-пауза

- 17:00 17:20 Трифон Попов, С. Христова, А. Живков
„Кооперативен ефект при адсорбция на цитохром С“
- 17:20 17:40 Васил Иванов, В. Тончев
„Класически модел на нестабилност на кристални повърхности: анализ на мащабите, интегриране и емуляция“

Секция „Полимери“

- 17:40 18:00 Савина Колева, Д. Николова, Е. Василева
„Поли(сулфобетатин метакрилатни) наночастици като носители за рутин хидрат“
- 18:00 18:20 Теодора Димитрова, М. Симеонов, Е. Василева
„3D принтиране на полимерни микроигли“
- 18:20 18:40 Petar Kushaev, V. Georgieva, N. Georgieva, G. Georgiev
„On the zwitterionic tripeptide Arg-Gly-Asp (RGD) for cancer theranostis“
- 18:40 19:00 Nadejda Georgieva, V. Toncheva, G. Georgiev
„Flocculation accelerated by the interval suspension addition“

16 май 2024, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Органична химия“

- 09:00 09:20 Елена Милинова, Й. Стремски, М. Бъчварова, Д. Киркова, Ст. Статкова-Абегхе
„Синтез на нови бензазакамалексинови аналози“
- 09:20 09:40 Деница Бъчварова, Й. Сапунджиева, П. Ангелов, Б. Горанов
„Синтез на алкалоида псеудан IX и неговите 3-карбоксамидни производни“
- 09:40 10:00 Изабела Танева, А. Стойков, М. Къндинска
„Нови потенциално биоактивни бензимидазолни и пиразолинови производни“
- 10:00 10:20 Михаил Коларски, З. Алсаман, Б. Петерс, П. Андерсон
„Иридий-катализирано асиметрично хидрогениране на ненаситени оксимови етери като подход за получаване на хирални алдехиди“

10:20 10:40 Кафе-пауза

- 10:40 11:00 Мария Иванова, Д. Шандурков, Р. Ляпчев
„Синтез на нафто-1,2-имидазалинови соли и някои техни производни“
- 11:00 11:20 Илиан Димитров, Н. Петкова-Янкова, А. Колева, Р. Николова
„Синтез и охарактеризиране на фосфоновите киселини от 1,2-бензоксафосфоринов тип с потенциална биологична активност“
- 11:20 11:40 Дона Саралиева, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова
„Синтез и структурно охарактеризиране на мостово-свързани бискумарини от стилбенов тип“
- 11:40 12:00 Натали Георгиева, М. Мутовска, Д. Манасиева, Ю. Загранярски
„Синтез на дихалкоген-заместени 1,8-нафталимиди за приложение като електродни материали“

12:00 13:00 Обедна почивка

- 13:00 13:20 Петър Бояджиев, М. Къндинска
„Нови хинолинови производни с потенциална противовирусна активност“
- 13:20 13:40 Нора Ангелова, Е. Найденова, Д. Даналев
„Синтез на нови аналози на антимикробния пептид ауреин 1.2 и изследване на влиянието на флуор в ароматното ядро на фенилаланин върху биологичната активност“
- 13:40 14:00 Надежда Бозова, А. Василев, С. Илиева, Д. Чешмеджиева
„Асиметрични монометинцианинови багрила за маркиране на нуклеинови киселини и FID анализ“
- 14:00 14:20 Стела Бобова, Мария Бъчварова, Й. Стремски, М. Тодорова, С. Статкова-Абегхе
„Свойства на мултифункционални молекули с потенциално приложение в козметиката“
- 14:20 14:40 Пламен Чорбаджиев, Д. Гергинова, С. Симова
„Химично профилиране на пшенични бири чрез ЯМР спектроскопия“

14:40 15:00 Кафе-пауза

Секция „Фармацевтична химия“

- 15:00 15:20 Люси Касъмова, С. Манолов, Д. Божилов, Й. Стремски, И. Иванов, С. Статкова-Абегхе
„Синтез на нови хибридни молекули между 2-аминобензотиазол и профени“
- 15:20 15:40 Йоана Петрова, С. Манолов, И. Иванов, Д. Божилов, П. Ангелов
„Синтез на нови профен функционализирани кетоамиди“
- 15:40 16:00 Валентин Петров, А. Пешева, А. Пъшев, Т. Александрова, Л. Петрова, М. Атанасова, Г. Ставрева, Г. Алтънков, Н. Бурджиев
„Синтез, анализ и оценка на биологичната активност на нови DPP-IV инхибитори“
- 16:00 16:20 Мартин Шарков, Е. Матеев, М. Георгиева, М. Кондева-Бурдина
„Синтез и охарактеризиране на серия пиролови производни съдържащи фрагмент от делта-аминовалерианова (5-аминопентанова) киселина“
- 16:20 16:40 Даниел Йорданов, О. Петров
„Синтез на нови, конформационно подвижни, анализи на комбретастатини с потенциална противотуморна активност“

16:40 17:00 Кафе-пауза

- 17:00 17:20 Дияна Димитрова, С. Манолов, И. Иванов, Д. Божилов
„Получаване на N-флурбипрофен заместени 1,2,3,4-тетрахидроизохинолини чрез реакция на вътрешномолекулно α -амидоалкилиране в условия на механохимичен синтез“
- 17:20 17:40 Кирила Йовчева, Р. Робева, Ю. Романова, М. Lattuada, В. Симеонов, М. Недялкова
„Изчислителен скрининг за потенциални агонисти на глюкагоноподобен пептид-1 рецептор сред производни на женски полови хормони“

Секция „Катализ“

- 17:40 18:00 Елжана Енчева, Г. Атанасова, З. Черкезова-Желева, М. Цветков
„Ефект на Cu(II) върху каталитичните способности на $GdFe_{1-x}CuO_3$ за активиране на пероксомоносулфат“

Секция „Аналитична химия“

- 18:20 18:40 Николай Петков, И. Панчева-Кадрева
„Сравнителен анализ на вибрационните спектри на монензин и негови координационни съединения“
- 18:40 19:00 Николай Даскалов, Х. Цачев
„Анализ и валидиране на метод за количествено определяне на Mometasone от твърди липидни наночастици“

17 май 2024, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Химични и фармацевтични технологии“

XXII Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2024

- 09:00 09:20 Владимир Петков, З. Винаров, С. Чолакова
„Стабилизиране на преситени разтвори на глибенкламид с помощта на целулозни полимери“
- 09:20 09:40 Поля Иванова, В. Петков, З. Винаров
„Разработване на аморфна форма на глибенкламид на базата на хидроксипропилметил целулоза“
- 09:40 10:00 Йордан Съйков, В. Петков, З. Винаров
„Изследване на агрегацията целулозни полимери в изкуствени чревни течности“
- 10:00 10:20 Лора Манова, Л. Винарова, С. Чолакова, З. Винаров
„Влияние на помощните вещества върху освобождаването на фенофибрат от липидни форми“
- 10:20 10:40 Кафе-пауза**
- 10:40 11:00 Христина Мирчева, З. Винаров
„Ин витро изследване на ензимното разграждане на лекарства в чревни течности след хранене“
- 11:00 11:20 Теодор Боянов, В. Петков, А. Трендафилова, З. Винаров, С. Чолакова
*„Солюбилизация на хидрофобни биоактивни компоненти от екстракт от *hypericum perforatum* L. В условията на симулирана стомашно-чревна среда“*
- 11:20 11:40 Ралица Узунова, К. Данов, Т. Гърков, Р. Станимирова
„Адсорбционни свойства на летливи амфифили на границата разтвор/пари“
- 11:40 12:00 Диана Ковачева, В. Яврукова, К. Маринова, К. Данов, Й. Петков
„Влияние на заряда на силициева подложка върху адсорбцията на катионни повърхностно-активни вещества“
- 12:00 13:00 Обедна почивка**
- 13:00 13:20 Татяна Славова, Г. Радулова, К. Данов
„Биконтинуални мицеларни фази: фазово разделяне и капацитет на наноемулгиране“
- 13:20 13:40 Маноела Алексиева, Г. Радулова, К. Данов, Й. Петков
„Образуване и характеризирание на гел, получен от смеси на MES и CAPB“
- 13:40 14:00 Александра Тодорова, Д. Чолакова, С. Чолакова
„Фазово поведение на натриев лауроил лактилат във вода и в органични разтворители“
- 14:00 14:20 Мира Алипиева, З. Митринова, С. Чолакова
„Влияние на типа анионно повърхностно-активно вещество върху неговите повърхности и пенообразуващи свойства“
- 14:20 14:40 Стефани Паскова, З. Митринова, С. Чолакова
„Роля на втори сърфактант върху реологичното поведение на натриев додецил етер сулфат в присъствието на сол“

14:40 15:00 Кафе-пауза

XXII Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2024

- 15:00 15:20 Вяра Йорданова, К. Русанова, Х. Блецова, З. Митринова, С. Чолакова
„Ефект на соли върху разтворимостта на конвенционални и био повърхностно-активни вещества“
- 15:20 15:40 Георги Георгиев, И. Лесов, С. Чолакова
„Зародишиообразуване в преситени емулсионни капки“
- 15:40 16:00 Никола Генчев, Ф. Мустан, Л. Винарова, J. Bevernage, С. Tistaert, А. Иванова, С. Чолакова, З. Винаров
„Молекулно-динамични симулации на солюбилизация на лекарствени вещества в смесени мицели от жлъчни соли и фосфолипиди“

Секция „Неорганична химия“

- 16:00 16:20 Магдалина Попова, М. Цветков, Д. Еленкова
„Лантаноидни метал-органични рамки с V-образен линкър за сензори във води“
- 16:20 16:40 Кристина Тамахкярова, П. Маринова, Н. Бурджиев, М. Милушева, Т. Атанасова, С. Цонева, Е. Върбанова, Р. Михайлова, Е. Чернева, Ю. Тумбарски
„Получаве на нови комплекси на Cu(II), Ni(II), Co(II) с (2-(метилкарбамоил)фенил)карбамат“

16:40 17:00 Кафе-пауза

- 17:00 17:20 Павел Николов, М. Цветков
„Механохимично асистиран твърдофазен синтез, охарактеризиране и оптични характеристики на $Y_{2-x}Tb_xHf_2O_7$ “
- 17:20 17:40 Антоний Сурчев, М. Цветков
„Структура и оптични свойства на нов вид флуоресцентни пирогерманати“

Секция „Фитохимия и фармакогнозия“

- 17:40 18:00 Данаил Павлов, М. Новакович, В. Тешевич, М. Николова, З. Господинова, Г. Антоу, Н. Кръстева, М. Ефтимов, А. Георгиева, Н. Стефанова, М. Цанева, М. Тодорова, М. Рейзов, С. Вълчева-Кузманова
*„Антитуморно, противовъзпалително и гастро-ентеро-хепатопротективно действие на биофлавоноида фустин, изолиран от дървесина на смрадлика (*Cotinus coggygria scop.*)“*
- 18:00 18:20 Димана Добрева
„От природата към лабораторията: Изследване на лекарствените растения“
- 18:20 18:40 Траян Груйкин, М. Бояджиев, В. Поповски, А. Стоянов
„Използване на teachable machine за автоматизирано идентифициране на микроскопски препарати от растителен материал (folium)“

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

19:30 Коктейл, пред 210 аудитория

СЕКЦИЯ ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ

Бояна Събчева, ФХФ - СУ

Стоян Граматиков, ФХФ - СУ

Вероника Петкова, ФХФ - СУ

Георги Василев, ФХФ - СУ, БАН

Калина Кръстилова, ФХФ - СУ

Чара Бориславова, ФХФ - СУ

Любен Бориславов, ИОНХ - БАН

Едуарда Енчева, ИФХ - БАН

Стоян Илиев, ФХФ - СУ

Владислава Петкова, ИОМТ - БАН

Никол Иванова, ФХФ - СУ

Катрин Петкова, ФХФ - СУ

КВАНТОВОХИМИЧНО МОДЕЛИРАНЕ НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕТО НА БОР С НАНОЧАСТИЦИ НА ПРЕХОДНИ МЕТАЛИ

Бояна Г. Събчева, Искра З. Колева, Християн А. Александров

*Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул.
Джеймс Баучър, 1164 София, e-mail: boyanasabcheva12051@gmail.com*

Преходните метали са често използвани като компоненти в хетерогенните каталитични системи. Така например никелът (Ni) катализира реакцията на риформинг на метан с водна пара [1], докато дехидрогенирането на алкани до алкени се катализира от платина (Pt) [2]. Структурата на хетерогенните катализатори, обаче може да променя деструктивно по време на каталитичните процеси. По повърхността на преходните метали могат да се образуват натрупвания от въглеродни частици,¹ които да блокират каталитичните центрове или структурата на катализатора да започне да се разрушава под въздействието на адсорбати като H [3].

Борните атоми проявяват подобни предпочитания за свързване като въглеродните и могат да блокират определени позиции, където обикновено се образуват C натрупвания. Така може да се подобри устойчивостта и селективното действие на катализатора [4]. За да изучим по-добре взаимодействието на бор с някои от най-използваните в катализа преходни метали (Rh, Ir, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag и Au), чрез периодични квантовохимични изчисления базирани на теорията на функционала на плътността изяснихме енергетично най-изгодните позиции за сорбция на B на повърхността и в подповърхностната област на метални наночастици с размер от ~1 nm.

Цитати:

1. Xu, J., Chen, L., Tan, K. F., Borgna, A., & Saeys, M. *J. Catal.*, 2009, 261(2), 158-165.
2. Aly, M., Fornero, E. L., Leon-Garzon, A. R., Galvita, V. V., & Saeys, M., *ACS Catal.*, 2020, 10(9), 5208-5216.
3. Kim, S. H., Yoo, S. H., Aota, L. S., El-Zoka, A., Kang, P., Lee, Y., & Gault, B., *arXiv preprint arXiv:2302.02588*, 2023
4. Saeys, M., Tan, K. F., Chang, J., & Borgna, A., *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2010, 49(21), 11098-11100.

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“).

КВАНТОВОХИМИЧНО МОДЕЛИРАНЕ НА ВЛИЯНИЕТО НА ОРГАНИЧНИ АГЕНТИ ВЪРХУ ГЕРМАНОСИЛИКАТНИ ЗЕОЛИТИ

Стоян Граматиков¹, Петко Петков¹ и Георги Вайсилов¹

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Органична химия и фармакогнозия, sgramatikov@chem.uni-sofia.bg

Вмъкването на германий в състава на зеолитните материали може да доведе до получаване на нови структури с много голям размер на порите и интересни свойства. Обикновено Ge атоми са разположени в двойни четиричленни пръстени (D4R) или други малки структурни единици. Получаването на германосиликатни зеолити може да се осъществи чрез използването на помощни органични молекули като структуро-насочващи агенти. Част от тези агенти са кватарнерните амониеви соли и протонирани амини. Често зарядът на тези органични катиони е компенсиран от флуоридни аниони.

Чрез квантовохимични и молекулнодинамични симулации са моделирани два германосиликатни зеолита – SCM-15 и GeMFI. Германосиликатът SCM-15 е синтезиран с помощта на протониран от флуороводородна киселина 4-пиридинопиридин^[1]. Оценено е влиянието на разпределението на Ge центрове и на ориентацията на молекулите темплейт^[2] върху стабилността на структурата. Също така са оптимизирани модели с различни позиции на флуоридния анион^[3]. Наличието на 4-пиридинопиридин в каналите на SCM-15 стабилизира зеолитна решетка, в която Ge центрове са равномерно разпределени, за разлика от чистата структура, в която германийт е концентриран в малко на брой двойни четиричленни пръстени.

Вторият изследван зеолит е GeMFI, който наскоро е получен със забележително високо съдържание на германий (16%). GeMFI е синтезиран с тетрапропиламониев флуорид. Интересно е, че при увеличаване на съдържанието на Ge, сигналът за ¹⁹F изчезва в ЯМР спектъра. Предполага се, че компенсацията на заряда от TPA⁺ се осъществява чрез допълнителен кислород, чрез който се формира двоен кислороден мост между два германиеви центъра. Изчислени са енергиите на вътрешните електронни нива на Ge в зеолитната решетка и е направен анализ на спиновата плътност на системата. Енергиите на вътрешните нива на Ge в оптимизираните модели на GeMFI, както в стандартната структура, така и в тази с двойни кислородни мостове, съответстват на експерименталните XPS данни, които отчитат отместване от 0.2 и 0.4 eV в 2p нивата на пробите с и без темплейт спрямо GeO₂.

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

² S. P. Gramatikov, P. St. Petkov, Z. Wang, W. Yang and G. N. Vayssilov (2024) Variation of the Orientations of Organic Structure-Directing Agents inside the Channels of SCM-14 and SCM-15 Germanosilicates Obtained by Ab Initio Molecular Dynamic Simulations. *Nanomaterials* 2024, 14, 159.

³ S. P. Gramatikov, P. St. Petkov, Z. Wang, W. Yang and G. N. Vayssilov (2024) The interaction of the structure-directing agent with the zeolite framework determines germanium distribution in SCM-15 germanosilicate. *Front. Chem. Sci. Eng.* 18, 58.

МОДЕЛИРАНЕ НА НА КЛЪСТЕРИ В ПОРИ НА НЕГРАФИТИЗИРАН ВЪГЛЕРОД

Вероника Петкова, Христо Рашеев

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Физикохимия, Лаборатория по квантова и изчислителна химия,
veronikapetkova00@gmail.com*

Твърдият въглерод, материал получен при нагряването на отпадъчна органична маса в безкислородна среда, се счита за най-перспективния аноден материал за натриево-йонните батерии, които се смятат за батериите на близкото бъдеще и към които има неимоверен научен интерес в наши дни. Материалът се получава от разнообразни по характер суровини, най-вече от биомаса, и е с пореста структура, която осигурява възможност за миграция на натриевите йони. Полученият материал има ненапълно дефинирана структура, която зависи от суровината, от която е синтезиран. Според най-новата представа твърдият въглерод трябва да съдържа силно деформирани непланарни прекъснати спрегнати въглеродни фрагменти с изобилие от небензоидни цикли. Такъв вид структура съдържа различни по форма и обем пори, които може да се класифицират според размера на нано- или микро-пори, или според проходимостта на затворени или отворени.

Когато от батерията черпим ток, на анода протича окисление на токоносителя. От литературата е известна склонността на натрия да образува клъстери, особено когато тези клъстери са положително заредени. Порите на твърдия въглерод са особено подходящи за образуване и нарастване на тези клъстери и те се превръщат в депа за натрий. Все още не е напълно изяснено дали формирането на тези депа води до повишен обратим капацитет или до необратим такъв. Целта на нашето изследване е да проследи механизма и енергетиката на формиране, нарастване и разграждане на натриевите клъстери в отворени цилиндрични пори, моделирани посредством нанотръби с различен диаметър в периодични гранични условия, или фрагменти от затворени пори с крайни размери. Използвали сме Теорията на функционала на плътността (DFT). Пресметнат е електродният потенциал, при който се образуват клъстерите, и е оценен преносът на заряд като функция от размера им.

Изследването е част от мащабния проект **„Био-въглеродни материали: обратимо взаимодействие на натрий с неподредени структури“** финансиран по договор КП-06-ПН-69/9 от 15.12.2022.

РЕДОКС ПРОЦЕСИ В ЕЛЕКТРОЛИТИ ЗА МЕТАЛ-ЙОННИ БАТЕРИИ

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

¹ *Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“ №1, София 1164, gvassilev1199@gmail.com*

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

Електролитът LP30 е изграден от 1M LiPF₆, разтворена в смес от етилен карбонат (EC) и диметил карбонат (DMC) в молно отношение 1:1 и е широко използван в литиево-йонните батерии (LIBs). От друга страна, в натриево-йонните батерии (SIBs), основен избор за разтворител е пропилен карбонат (PC) в комбинация с NaPF₆. Резултати от предварителни експериментални изследвания върху LP30 показват, че в рамките на прозореца на електрохимична стабилност (ESW) по време на окислителния и редукционния етап, се наблюдава появата на стабилни радикали. Изненадващо е, че спектрите, получени чрез електронен парамагнитен резонанс (EPR) са идентични и в двата етапа, което означава, че се образуват еднакви парамагнитни съединения. В случая на електролит, подходящ за SIBs, EPR сигналите по време на окислителното и редукционното сканиране не съвпадат, предполагайки наличието на различни радикали.

В настоящото изследване е използвана Теорията на функционала на плътността за интерпретация на експериментално получените спектри, както и за очертаване на основните разлики между EC и PC. Изчислени са g-факторите на различни радикали и са изследвани ефектите на някои от често използваните добавки в електролитите. Катион-радикалите са нестабилни и биха се депротонирали до неутрални радикали, чиито изчислени g-фактори са подобни на експерименталните. Липсата на свръхфина структура в пробата, съдържаща LP30, обаче отхвърля възможността те да са източник на EPR сигнала. Това ни доведе до предположението, че регистрираните радикали, дори в етапа на окисление, са анион-радикали, вследствие на утечка на електрони на повърхността на електрода. Изследвани са процеси на хомо- и хетеро-димеризация на редуцираните циклични карбонати, както и комплексообразуването в резултат на солватацията на Li⁺ и Na⁺.

Изследването е финансирано по проект CARI-M-VIHREN, КП06-ДБ-6/16.12.2019 към Фонд научни изследвания.

ТЕОРЕТИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА ПИЛАР[5]АРЕН КАТО МОДЕЛ НА БИОМЕМБРАНЕН ВОДЕН КАНАЛ

Калина Кръстилова¹, Христо Рашеев¹, Аля Таджер¹,
Силвия Ангелова^{2,3}, Валя Николова¹

¹ *Факултет по химия и фармация, Софийски университет "Св. Климент
Охридски"; kalikrastilova@gmail.com*

² *Институт по оптически материали и технологии "Акад. Йордан Малиновски",
Българска академия на науките",*

³ *Химикотехнологичен и металургичен университет, бул. "Св. Климент Охридски" № 8,
1756 София, България*

Мембраните намират широко приложение в разделителните процеси, особено при пречистване на вода. Биологичните мембрани в живите клетки, за разлика от синтетичните, притежават изключителни транспортни качества и структурни характеристики – монодисперсност в размера на порите, висока селективност, висока скорост на потока, както и свойства на отхвърляне на конкретни съединения или йони. Това се дължи на наличието на трансмембранни протеини, познати още като аквапорини, които играят ролята на водни канали.¹ Забележителният състав, структура, получаване и функция на естествени или биологични материали е вдъхновение при разработването на биомиметични и биоинспирирани мембрани. Пилар[5]арен и неговите производни са един от двата основни класа синтетични едномолекулни трансмембранни канали.²

Цел на настоящото изследване е молекулно моделиране (с методите на Теория на функционала на плътността) на взаимодействието на (немодифициран/модифициран) пилар[5]арен с молекули вода в опит за изясняване на молекулната архитектура на комплексите пилар[5]арен/вода и механизма на субстратна (водна) специфичност на този модел на изкуствен воден канал.

Цитати:

1. P. Agre, S. Sasaki and M. J. Chrispeels, *Am. J. Physiol. Physiol.*, 1993, 265, F461–F461.
2. W. Song, C. Lang, Y. Shen and M. Kumar, *Annu. Rev. Mater. Res.*, 2018, 48, 57–82.

Изследването е финансирано от Фонд "Научни изследвания" по проект КП-06-Н79/8 от 15.12.2023 г. на тема "Биоинспириран дизайн на изкуствени водни канали (BioTIARA)".

СТАТИСТИЧЕСКО МОДЕЛИРАНЕ НА СИНГЛЕТ-ТРИПЛЕТНОТО РАЗЦЕПВАНЕ В СИНИ TADF ЕМИТЕРИ ЗА OLED

Чара Бориславова¹, Симона Джумайска¹, Анела Иванова¹

¹ Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Физикохимия, бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164 София,
cborislavova@chem.uni-sofia.bg

В днешния зависим от електрониката свят постоянно се работи по подобрието на различни светлинни технологии. Стремежът при органичните светодиоди (OLED) е да се увеличи разнообразието от ефективно флуоресциращи сини устройства чрез подобряване на емитерите на светлина в тях. Един от методите за постигането на тази цел е дизайнът на багрила проявяващи термично активирана забавена флуоресценция (TADF) [1]. За да притежават съединенията това свойство и да излъчват в синята област, те трябва да имат много малко синглет-триплетно разцепване ($\Delta(S_1-T_1)$) и високоенергетично първо възбудено синглетно (S_1) състояние. Установено е, че за постигането на тези изисквания е подходяща молекулна структура, включваща електрон-донор и електрон-акцептор, като те могат да бъдат разделени от мостови фрагмент за по-фина настройка на възбудените състояния [2]. Дизайнът на конкретни багрила обаче не е еднозначен. Целта на текущата работа е конструирането на статистически модели с многомерна линейна регресия и регресия на главните компоненти за изясняване на факторите, от които зависи $\Delta(S_1-T_1)$ чрез корелиране с дескриптори получени от (TD)DFT изчисления.

Съставени са оптимални модели, от които са определени ключови характеристики (тип на донора и акцептора, пренос на заряд между фрагментите), влияещи на синглет-триплетното разцепване. Моделите разкриват кооперативна природа на факторите определящи $\Delta(S_1-T_1)$. Сравнение между двата модела показва, че регресията на главните компоненти дава резултати по-близки до квантово-химичните изчисления.

Статистическите модели предсказват качествено точно $\Delta(S_1-T_1)$, което позволява по-насочен дизайн на TADF емитери.

Благодарности: Изчисленията в разработката са финансирани по проект № КП-06-H49/3 от 26. 11. 2020 г. на Фонд „Научни изследвания“.

Цитати:

1. C. Adachi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2014, 53, 060101
2. G. Valchanov, A. Ivanova, A. Tadjer, D. Chercka, M. Baumgarten, *J. Phys. Chem. A*, 2016, 120, 6944

TD-DFT/TDA ПОДХОДИ, ДИРАДИКАЛОВ ХАРАКТЕР И ХРОМОФОРИ ЗА СИНГЛЕТНО РАЗЦЕПВАНЕ: НЕОЧАКВАНО ДОБРА КОМБИНАЦИЯ

Любен Бориславов¹, Йоанна Стойчева², Аля Таджер², Юлия Романова²

¹*Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките, ул. „Акад. Георги Бончев“ 11, 1113 София*

²*СУ “Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация, бул. Джеймс Баучер 1, 1164, София
e-mail:jromanova@chem.uni-sofia.bg*

Органичните хромофори за синглетно разцепване са ценни материали за фотоволтаиката, защото могат да осигурят висока ефективност, надхвърляща границите на използваните в момента соларни клетки [1]. Изискванията към тези вещества обаче са трудно постижими и откриването им не е лесно. Те трябва да поглъщат интензивно във видимата област, да имат нискоенергетично първо и високоенергетично второ триплетно възбудено състояние.

Знае се, че нискоенергетично триплетно състояние имат хромофори с частично отворена електронна обвивка или така наречените дирадикалоиди (съединения с дирадикалов характер в диапазона от 0.1-0.5) [2]. Ето защо, моделирането на тези материали изисква прилагането на прецизни многоконфигурационни методи с висока изчислителна цена. Поради размера на хромофорите за синглетно разцепване обаче, често най-използваните изчислителни подходи при дизайна им са базирани на времезависимата теория на функционала на плътността (TD-DFT/TDA), която представлява еднореферентен подход с характерна триплетна нестабилност.

Цел на настоящото изследване е създаването на регресионни модели, които предсказват с точност на мултиконфигурационни методи енергиите на възбуждане при хромофори за синглетно разцепване въз основа на TD-DFT/TDA изчисления и теоретични данни за дирадикаловия им характер. Въпреки своята простота, разработените от нас линейни и експоненциални регресионни модели показват отлична успеваемост и със значителна точност предсказват енергиите на възбуждане на голям брой външни за модела хромофори за синглетно разцепване.

Изследването е финансирано по договор КП-06/Н39/2/2019 с ФНИ към МОН.

1. M. B. Smith, J. Michl, *Chem. Rev.*, 2010, vol. 110(11), 6891-6936

2. L. Borislavov, M. Nedyalkova, A. Tadjer, O. Aydemir, J. Romanova. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2023, vol. 14(45), 10103–10112

ТЕОРЕТИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА САМООРГАНИЗАЦИЯТА НА ДВУАНТЕНЕН ОЛИГОГЛИЦИН В ОБЕМНА ВОДНА ФАЗА

Едуарда Енчева¹, Стоян Илиев², Анела Иванова² и Елена Милева¹

¹ *Българска академия на науките, Институт по физикохимия, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 11, 1113, София (България), eduardaencheva@gmail.com, mileva@ipc.bas.bg.*

² *Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучър“, 1164, София (България), fhsi@chem.uni-sofia.bg, aivanova@chem.uni-sofia.bg.*

Двуантенните олигоглицини са сравнително нов клас биосъвместими вещества, получени чрез насочен молекулен дизайн [1]. Те са изградени от два еднакво дълги олигоглицинови сегмента, прикрепени към противоположните краища на централна алкилова верига. Във водна среда тези амфифилни пептиди могат да се самоорганизируют в наноразмерни структури, наречени тектомери [2]. Макар и стабилни при дадени условия, формата и размерите на тектомерните агрегати могат да бъдат регулирани чрез промяна на параметрите на средата като рН, температура, йонна сила и концентрация на олигоглицина [2, 3]. Поради специфичните структура и свойства, двуантенните олигоглицини и тектомерите, формирани от тях, придобиват все по-голямо значение в различни сфери на приложение като медицина, фармация, нанотехнологии. Въпреки засилващия се интерес към тези вещества, агрегатите на олигоглицините все още не са били обект на систематично теоретично моделиране.

В настоящата работа е представено атомистично молекулно-динамично изследване на поведението на специфичен вид двуантенен олигоглицин. Подробно е обследван процесът на обемна самоорганизация на амфифила във водна среда. Описани са формата и размерите на получените агрегати. Направен е анализ на важни характеристики на системата: Н-връзки, кинетика на агрегиране, описание на вторичните структури на пептидните елементи. Установено е, че в рамките на 500 ps молекулите образуват сферична мицела с агрегационно число, близко до очакваното. Тя се стабилизира от голям брой водородни връзки между олигоглициновите вериги за сметка на отслабено вътрешномолекулно водородно свързване. Получените резултати допринасят за разбиране на процеса на обемна самоорганизация на двуантенните олигоглицини и разкриват нови насоки за бъдещи приложения.

Цитати:

1. N. Bovin et al., *Nanotechnologies Russ.*, 2008, vol. 3, 291–302.
2. D. Arabadzhieva et al., *ChemSusChem*, 2019, vol. 12, 672–683.
3. D. Arabadzhieva et al., *Colloids Surf.*, 2021, vol. 630, 127591.

ОПРЕДЕЛЯНЕ НА ФАЗИ ПОЛУЧЕНИ ОТ МОЛЕКУЛОДИНАМИЧНИ СИМУЛАЦИИ НА HEKSADEKAN-СЪДЪРЖАЩИ СИСТЕМИ СЛЕД ЗАМРЪЗВАНЕ

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

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

Известно е, че при охлаждане алкани с дължина на веригата с повече от 15 въглеродни атома преминават през междинна подредена фаза, наречена ротаторна, преди да формират кристал. В това състояние молекулите имат допълнителна ротационна степен на свобода, която съответства на въртене около дългата молекулна ос. Тази характеристика води до комплексно виско-пластично реологично поведение, което може да се използва за разработване на лубриканти, материали за съхранение на енергия и др.¹ Формирането на ротаторните фази все още не е напълно обяснено на молекулно ниво. В настоящото изследване модели на обемен хексадекан и на хексадекан/сърфактант/вода са охладени и симулирани с класическа молекулна динамика, за да се проследи процесът на замръзване. Охарактеризиран е ефектът от скоростта на охлаждане. Установено е, че при всички системи и скорости на охлаждане се получава поликристална структура. Разработена е процедура за идентифициране и изолиране на отделните кристали. Определен е видът на подредената фаза чрез три различни структурни свойства: ъгъл на наклон на молекулите в кристалитите (θ), параметър на деформация на елементарната клетка (D) и ъгъл на деформация на молекулите в елементарната клетка (Φ_d). Анализирани са фазите, през които преминават системите при охлаждане. Показано е, че хексадекановите системи преминават през няколко ротаторни фази, преди да достигнат най-стабилното си подредено състояние - триклинен кристал.

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

Цитати:

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

МОДЕЛИ НА БИОМЕМБРАННИ ВОДНИ КАНАЛИ, БАЗИРАНИ НА 1,8-НАФТАЛИМИД: ИЗСЛЕДВАНЕ С МЕТОДИТЕ НА ТЕОРИЯ НА ФУНКЦИОНАЛА НА ПЛЪТНОСТТА

**В. Петкова¹, Н. Кирчева¹, С. Добрев¹, М. Мутовска², В. Николова²,
Ю. Загранярска², Т. Дудев², С. Ангелова^{1,3}**

¹ *Институт по оптически материали и технологии "Акад. Й. Малиновски",
Българска академия на науките, ул. "Акад. Г. Бончев", бл.109, 1113 София, България,
vpetkova@iomt.bas.bg*

² *Факултет по химия и фармация, Софийски университет "Св. Климент Охридски",
1164 София, бул. Джеймс Баучър 1, България*

³ *Химикотехнологичен и металургичен университет, бул. "Св. Климент Охридски" № 8,
1756 София, България*

Биологичните мембрани позволяват съществуването на живота такъв, какъвто го познаваме. Биологичната мембрана е не само граница между извънклетъчната среда и клетъчните компоненти, но и контролира взаимодействието на клетката с околната среда и регулира транспорта и сигнализирането през бариерата. Откриването на канали (пори), които улесняват движението на водата през мембраните на биологичните клетки, е важна стъпка в разбирането на устройството на клетката и носи Нобелова награда по химия на Питър Агре. Изкуствените/синтетичните мембрани имат за цел да пресъздадат биологичните мембранни компоненти със синтетични модели, като същевременно запазват техните изключителни способности за молекулно разделяне. Разработените до момента изкуствени водни канали могат да бъдат разделени на две основни групи: самоасемблиращи се канали (мономери, които се стабилизират в пореста структура чрез междумолекулни сили като хидрофобни взаимодействия или водородни връзки) и едномолекулни канали (единични надмолекулни съединения).

Цел на настоящото изследване е моделиране на надмолекулни структури с вътрешни отворени пори на основата на амфифилни *peri*-заместени 1,8-нафталимиди. Проведени са изчисления с методите на Теория на функционала на плътността и са определени термодинамичните параметри на процесите на взаимодействие между моделите на водните канали и включените/транспортирани водни молекули.

Изследването е финансирано от Фонд "Научни изследвания" по проект КП-06-Н79/8 от 15.12.2023 г. на тема "Биоинспириран дизайн на изкуствени водни канали (BioTIARA)".

ТЕОРЕТИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА КОМПЛЕКСИ НА УРАНИЛОВ КАТИОН С ВОДНИ МОЛЕКУЛИ И КАЛИКСАРЕНИ

Никол Иванова¹, Валя Николова¹, Силвия Ангелова^{2,3}

¹ Факултет по химия и фармация, Софийски университет "Св. Климент Охридски",
1164 София, бул. Джеймс Баучър 1, България, nikol.joe23@gmail.com

² Институт по оптически материали и технологии "Акад. Й. Малиновски",

Българска академия на науките, ул. "Акад. Г. Бончев", бл.109, 1113 София, България

³ Химикотехнологичен и металургичен университет, бул. "Св. Климент Охридски" № 8,
1756 София, България

Ураниловият катион (UO_2^{2+}) е обект на значителен интерес поради ролята му в ядрения горивен цикъл и потенциалното въздействие на уранил-съдържащите материали върху околната среда. Извличането на UO_2^{2+} от морска вода и от ядрени отпадъци, основано на селективно свързване със синтетични йонофори, е много важно в контекста на устойчивото производство на ядрена енергия. По отношение на проектирането на синтетични йонофори за UO_2^{2+} е важно да се оцени стабилността на получените комплекси на UO_2^{2+} като функция на околната среда и солватацията на катиона. Установено е, че каликсарените са подходящи молекули-домакини за UO_2^{2+} , тъй като техните мономерни фенолни единици имат лигиращи групи, оптимално разположени в една равнина. Освен това каликсарените могат лесно да се функционализират за свързване например с биологични молекули носители, без да се променят функционалните групи, разположени на долния ръб за комплексообразуване с металните/комплексните катиони.

Цел на настоящото изследване е моделиране на комплекси на включване на UO_2^{2+} в *p*-сулфонатокаликс[*n*]арени с различен размер на макроцикъла ($n=4-6$). Проведени са изчисления с методите на Теория на функционала на плътността и са определени термодинамичните параметри на съответните реакции на образуване на комплекси на включване. Разгледани са и реакциите на солватация на UO_2^{2+} .

Изследването е финансирано от Фонд "Научни изследвания" по проект КП-06-Н79/8 от 15.12.2023 г. на тема "Биоинспириран дизайн на изкуствени водни канали (BioTIARA)".

МОЛЕКУЛЕН КОНСТРУКТОР ОТ ДИРАДИКАЛОИДНИ ФРАГМЕНТИ - НАРЪЧНИК ЗА ДИЗАЙН НА ВИСОКОЕФЕКТИВНИ ФОТОВОЛТАИЦИ

Катрин Петкова¹, Любен Бориславов^{1,2}, Аля Таджер¹, Юлия Романова^{1,*}

¹СУ “Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация, бул. Джеймс Баучер 1,
1164, София

²Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките, ул. „Акад.
Георги Бончев“ 11, 1113 София
e-mail:jromanova@chem.uni-sofia.bg

Ефикасното улавяне на енергията от слънчевата светлина и превръщането ѝ в електрическа е сложно начинание, за което се разработват няколко стратегии. Една от тях е използването на фотофизичния процес на синглетно разцепване. Процесът е характерен за органични хромофори и има потенциал да произведе двойно повече токоносители в сравнение със слънчеви клетки на база силиций.¹ Недостатък на хромофорите за синглетно разцепване обаче е, че се срещат относително рядко.² Ето защо е важно да се познават структурните фактори, които влияят върху условията за синглетно разцепване и да се намерят нови дизайнерски стратегии за синтез на хромофори. В настоящето изследване представяме оригинална концепция за комбинаторно конструиране на високо ефективни хромофори за синглетно разцепване на база дирадикалов характер. Концепцията е лесна за автоматизация посредством високопроизводителни изчисления и библиотеки от подходящи дирадикалоидни фрагменти.

Изследването е финансирано по договор КП-06-Н39/2 от 2019 г. с ФНИ към МОН.

Цитати:

1. M. B. Smith, J. Michl, *Chem. Rev.* 2010, vol. 110, 6891–6936.
2. L. Borislavov, M. Nedyalkova, A. Tadjer, O. Aydemir, J. Romanova, *J. Phys. Chem. Lett.* 2023, vol. 14, 10103–10112.

СЕКЦИЯ ФИЗИКОХИМИЯ

Иво Лозанов, ФХФ - СУ

Филип Маринов, МУ Плевен

Елица Гъдева, ХФ - ПУ

Трифон Попов, МФ - МУ София

Васил Иванов, ФМИ - СУ

КОНСТРУИРАНЕ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА ЕВТИН СЪПРОТИВИТЕЛЕН ДИФЕРЕНЦИАЛЕН ТЕРМОМЕТЪР В ИНТЕРВАЛ 20 - 100°C

Иво И. Лозанов¹, Л. Лютов^{1,2}

¹ *Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, 1164 София, ж.к. Лозенец, бул. Джеймс Баучер 1*

² *Институт по металознание, съоръжения и технологии с Център по хидро- и аеродинамика „Акад. Ангел Балевски“, БАН, 1574 София, ул. Шипченски проход 67*

Предложена е модификация с 4хPt1000 съпротивления на известния Уитстонов мост. Новата модификация е предназначена да функционира като прецизен диференциален термометър за директно измерване на малки температурни разлики ($\approx 5^{\circ}\text{C}$) между две среди с голяма точност. Извършено е теоретично и експериментално изследване на възможностите и характеристиките на конструирания уред в температурен интервал от 20 до 100°C. Теоретичното сравнение на параметрите на предложената схема с тези на алтернативна 2хPt1000 схема показва значително по-голяма стабилност и точност от страна на първата. Достигната е максимална относителна грешка под $\pm 0.6\%$ ($\pm 0.10^{\circ}\text{C}$), която е значително по-малка от грешките на еталонни термодвойки тип S (± 0.5 - 1.0°C). Представеният термометър е отличен евтин заместител на Бекмановия термометър и термодвойките при прецизни измервания на температурни разлики в областта на физиката, химията, метрологията и други.

ВЛИЯНИЕ НА ЙОНИЗИРАЩОТО ЛЪЧЕНИЕ, ГЕНЕРИРАНО ОТ ЕДИЦИНСКИ ЛИНЕЕН УСКОРИТЕЛ (LINAC), ВЪРХУ СТРУКТУРАТА И ФУНКЦИИТЕ НА ЕНЗИМИТЕ.

Филип Маринов¹, Иво Петров², Цветослав Лъзовски², Петър Темнишки³,
Крум Стоилов², Светла Петрова⁴, Константин Балашев⁵

¹ Медицински университет – Плевен, сектор Медицинска физика и биофизика, Плевен,
ул. Кл. Охридски № 1 e-mail: filip.marinov@mu-pleven.bg

² МБАЛ „Сърце и Мозък“ Плевен, Медицинска физика, Плевен, ул. Пиер Кюри № 2
e-mails: i.petrov.pn@heartandbrain.bg, ts.lazhovski.pn@heartandbrain.bg,
k.stoilov1970@gmail.com

³ Медицински университет – Плевен, сектор Биохимия, Плевен, ул. Кл. Охридски № 1
e-mail: petar.temnishki@gmail.com

⁴ Софийски университет, Биологически факултет, София, ул. Драган Цанков № 8
e-mail: spetrova@biofac.uni-sofia.bg

⁵ Софийски университет, Факултет по химия и фармация, София, бул. Дж.Баучер № 1
e-mail: fhkb@chem.uni-sofia.bg

Влиянието на различните видове йонизиращи лъчения върху неорганичните и особено върху органичните вещества винаги е играла важна роля в човешката цивилизация. В областта на медицината, фармацията и биологичните науки, откриването на радиоактивността е тясно свързано с защитата от нея или с използването ѝ за въздействие върху живите системи. Специалната роля на радиацията се дължи на съществуването на естествения радиоактивен фон, който играе важна роля в мутационните и еволюционните процеси. И накрая, но не и по важност, е технологичното използване на източниците на йонизиращо лъчение, както и на контролираните ядрените реакции, което е довело до получаването на огромни количества енергия, но и до замърсяване на екосистемата с радиоактивни отпадъци и емисии. Следователно най-важният аспект в моделирането на процесите, при които се получават радикали в резултат на йонизиращо лъчение, е свързан с увреждането на естествената структура на биологичните макромолекули, чиято физиологична роля е от основно значение за функционирането на клетките и организмите като цяло. Главна цел на нашите изследвания е да разберем молекулярните и кинетичните механизми на действието на йонизиращото лъчение върху биологично важните молекули и агрегати и да намерим подходящи експериментални протоколи и модели които ги описват.

Като пример ще предложим експериментален протокол, който включва използването на линеен ускорител за медицински цели (LINAC), който създава уникални експериментални условия за хомогенно облъчване на разтвори на определени ензими, които играят решаваща физиологична роля. Към експерименталната обстановка използваме медицинска дозиметрична система за прецизно измерване, изчисляване и проверка на дозите йонизиращо фотонно лъчение генерирано от ускорителя. Разработеният експериментален подход позволява да се получат кинетични данни за конкретните реакции, катализирани от ензимите, които са били предварително облъчени с различни дози и освен това дава представа за възможните промени в активния център и в молекулната структура на ензимите под действието на йонизиращото лъчение.

Цитати:

[1] R. G. Hussey, W. R. Thomson, J. Gen. Physiol. 1923, 24 (6) 1-5

[2] W.M. Dale, Irradiation effects on enzymes (in vitro). In: Zuppinger, A. (eds) Strahlenbiologie / Radiation Biology. Handbuch der Medizinischen Radiologie / Encyclopedia of Medical Radiology,

1966, vol 2/1. Springer, Berlin, Heidelberg

1-ЕТИЛ-3-МЕТИЛИМИДАЗОЛИЕВ ОКТАНОАТ, [C₂MIM][C₇H₁₅COO] - ТЕРМОФИЗИЧНИ СВОЙСТВА НА СМЕСИТЕ МУ С ВОДА И ЙОНАНОФЛУИД С МЕЛАНИН

Elitsa Gadeva¹, V. Ivanova-Kolcheva¹, Rafael M. Almeida², Ângela F. Santos², Maria José V. Lourenço², Carlos Nieto de Castro²

¹*University of Plovdiv “Paisii Hilendarski”, Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, Plovdiv, Bulgaria
eli.gadeva@gmail.com*

²*Centro de Química Estrutural, Institute of Molecular Sciences, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa (Portugal)
cacastro@ciencias.ulisboa.pt*

През последните няколко години, интересът на научната общност се насочва все повече към оптимизирането на настоящите енергийни технологии. Една от областите, предизвикваща все по-голям интерес е потенциалното приложение на йонните течности (ЙТ) като топлоносители в слънчевите топлинни системи [1]. Тези течности имат уникални свойства, които ги правят привлекателни както за учените, така и за промишлеността. Те се характеризират с пренебрежимо ниско парно налягане, невъзпламеняемост, висока термична и електрохимична стабилност, „настройващи се свойства”, ниска токсичност и др.. За да се превърнат в практичен избор за промишлени приложения, от съществено значение е изследването на техните термофизични свойства, особено в смеси с вода, което би повлияло значително върху тяхната висока цена и вискозитет.

Целта на настоящото изследване е да се проучи влиянието на водата върху термофизичните свойства (плътност, скорост на звука, топлопроводимост) на [C₂MIM][C₇H₁₅COO] с помощта на измервателни техники и оборудване, характеризиращи се с минимална неопределеност и максимална точност. Представени са и данни за свойствата на „чистата” ЙТ, получени чрез метода на квадратичната екстраполация при молна фракция на водата $\chi_w=0$. Изследвано е и влиянието на нетоксични наноматериали (меланинови частици, получени от мастилената торбичка на главоноги) върху топлопроводимостта на йонанофлуид, съдържащ последните и [C₂MIM][C₇H₁₅COO].

[1] Paul, T. C., Tikadar, A., Mahamud, R., Salman, A. S., Morshed, A. K. M. M., & Khan, J. A. (2021). A Critical review on the development of Ionic Liquids-Based Nanofluids as heat transfer fluids for solar thermal energy. *Processes*, 9(5), 858

КООПЕРАТИВЕН ЕФЕКТ ПРИ АДСОРБЦИЯ НА ЦИТОХРОМ С

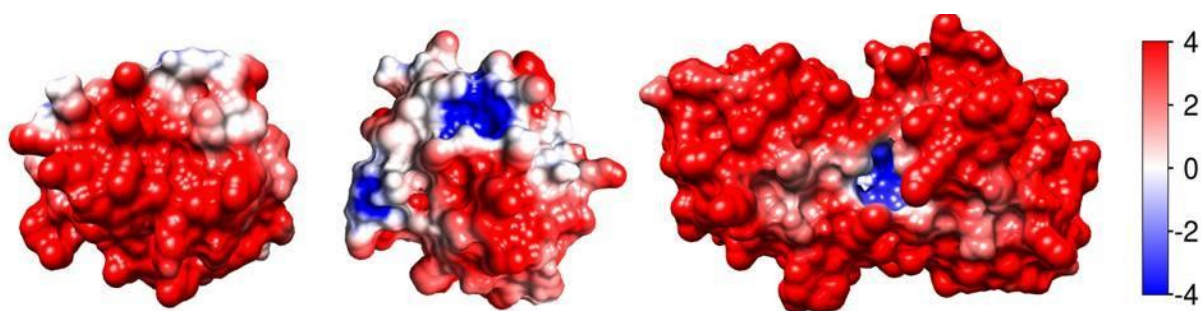
Трифон Т. Попов¹, Светлана Х. Христова², Александър М. Живков³

¹Медицински факултет, Медицински университет – София, ул. „Здраве“ 2, София, България; rorov.trifon@gmail.com

²Катедра по медицинска физика и биофизика, Медицински университет - София, ул. „Здраве“ 2, София, България; svhristova@medfac.mu-sofia.bg

³Научноизследователски център, СУ"Свети Климент Охридски", бул. "Драган Цанков" 8, 1164 София, България; amzhivkov@gmail.com

Монопластинки от минерала монтморилонит (ММ) придобиват антиракови свойства след адсорбция на митохондриалния протеин цитохром с (cytC) и могат бъдат поглъщани от туморните клетки чрез фагоцитоза. Въведеният екзогенен cytC инициира апоптоза (необратима каскада от биохимични реакции, водещи до клетъчна смърт). В настоящото проучване изследваме организацията на слоя cytC глобули върху повърхността на ММ нанопластинка, като използваме физикохимични и компютърни методи: микроелектрофореза, статично и електрическо светоразсейване за изследване адсорбцията на cytC върху ММ, белтъчна електростатика и докинг за изчисляване на локалния електростатичен потенциал и свободната енергия на взаимодействащи cytC глобули в протеинови димери и тримери. Измерената адсорбционна изотерма има S-образна форма, което показва положителен кооперативен ефект, появяващ се когато адсорбираните cytC глобули заемат повече от 1/3 от повърхността на ММ пластинка. Компютърният анализ разкрива, че кооперативният ефект се дължи на образуването на протеинови асоциации, в които глобулите на cytC са ориентирани с противоположно заредени участъци от повърхността им. Образуването на димери и тримери е съпроводено със силно намаляване на електростатичната компонента на свободната енергия при асоциирането, докато ван-дер-Валсовата компонента играе второстепенна роля.



Фигура 1. Две цитохромни глобули, образуващи димер в който участък с отрицателен електростатичен потенциал (син) контактуван с положително зареден (червен).

КЛАСИЧЕСКИ МОДЕЛ НА НЕСТАБИЛНОСТ НА КРИСТАЛНИ ПОВЪРХНОСТИ: АНАЛИЗ НА МАЩАБИТЕ, ИНТЕГРИРАНЕ И ЕМУЛАЦИЯ

Васил Иванов¹, Веселин Тончев

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, ЧМА, ФМИ, vvasilevi@fmi.uni-sofia.bg

² СУ „Св. Климент Охридски“, МГ, ФзФ, tonchev@phys.uni-sofia.bg

Класическият модел на *Стоянов-Тончев*¹ (ST) от 1998 г. е базов в разбирането и развитието на областта на групиране на стъпала върху вицинални кристални повърхности. Той и неговата естествена еволюция в модела на *Pimpinelli-Tonchev-Videcoq-Vladimirova*² (PTVV) водят до фундаментално разбиране на скейлинговите зависимости на основните размери на групите. Математическата структура на тези две уравнения (нелинейни ЧДУ от четвърти ред) и големият брой материални параметри в тях водят до технически затруднения при тяхното решаване.

В настоящия доклад ще бъде представен систематичен подход към *ST*, започвайки с обезразмеряването му (по подходящ начин). От обезразмереното частно уравнение ще бъде получено нелинейно стационарно ОДУ, формулирано като задача на Коши, която може лесно да бъде интегрирана числено с подходящ метод и така да бъдат потвърдени някои от скейлинговите връзки.

Поради специфичната сигмоидна форма на групите, ще бъдат демонстрирани резултати използвайки *ad hoc* аналитичните криви на *Ферхюлст*³ и *Ричардс*⁴. Тези модели ще бъдат използвани за „емулиране“ на профилите от *ST*-модела, чрез подходящо избиране на параметрите им, което от своя страна значително опростява анализа на числени и реални експерименти.

Цитати:

(1) Stoyanov, S.; Tonchev, V. Properties and Dynamic Interaction of Step Density Waves at a Crystal Surface during Electromigration Affected Sublimation. *Phys. Rev. B* **1998**, 58 (3), 1590–1600. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.1590>.

(2) Pimpinelli, A.; Tonchev, V.; Videcoq, A.; Vladimirova, M. Scaling and Universality of Self-Organized Patterns on Unstable Vicinal Surfaces. *Phys. Rev. Lett.* **2002**, 88 (20), 206103. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.206103>.

(3) Garnier, J. G.; Quetelet, A. *Correspondance Mathématique et Physique*; M.Hayez, imprimeur, 1838.

(4) RICHARDS, F. J. A Flexible Growth Function for Empirical Use. *Journal of Experimental Botany* **1959**, 10 (2), 290–301. <https://doi.org/10.1093/jxb/10.2.290>.

СЕКЦИЯ ПОЛИМЕРИ

Савина Колева, ФХФ - СУ

Теодора Димитрова, ФХФ - СУ

Petar Kushaev, University of Zurich

Nadejda Georgieva, ФХФ - СУ

ПОЛИ(СУЛФОБЕТАИН МЕТАКРИЛАТНИ) НАНОЧАСТИЦИ КАТО НОСИТЕЛИ ЗА РУТИН ХИДРАТ

Савина Колева¹, Деница Николова¹, Елена Василева¹

¹*Лаборатория структура и свойства на полимерите, Факултет по химия и фармация,
СУ „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучер, № 1, София, България,
savi.koleve02@gmail.com*

Полицвитерйоните са биосъвместими полимери с ниска неспецифична протеинова адсорбция и висока хидрофилност, което ги прави обект на изследване като потенциални материали за системи, които позволяват пасивен транспорт на активни вещества и биомолекули. Полицвитерйоните се характеризират с ниска цитотоксичност, незначителна имуногенност и добра стабилност. В допълнение, това са полимери, които са чувствителни към промени в рН, температурата и солевата концентрация на околната среда. Тези им способности ги определят като подходящи материали за разработване на интелигентни системи, които освобождават лекарствени или други активни вещества под въздействие на промяна в параметрите на околната среда. Поли(сулфобетаин метакрилат)ът е представител на полицвитерйонните полимери, който се отличава с изключително висока биосъвместимост.

Рутин хидратът е флаваноид, който притежава антиоксидантно, противовъзпалително и антибактериално действие. Известно е, че притежава антибактериална активност срещу бактерията *Staphylococcus aureus*, която е най-често срещания патоген причиняващ кожни инфекции.

Целта на това изследване е да бъдат разработени наночастици от поли(сулфобетаин метакрилат), които да бъдат използвани като носители за активното вещество рутин хидрат. Тези наночастици ще бъдат вложени в трансдермални пачове и използвани за третиране на кожни инфекции, причинени от *Staphylococcus aureus*.

В рамките на това изследване, успешно бяха синтезирани поли(сулфобетаин метакрилатни) наночастици чрез свободна радикалова полимеризация. Бе определена температурната зависимост на размерите на частиците с оглед планираното приложение за третиране на кожни инфекции. Получените наночастици бяха успешно натоварени с активното вещество рутин хидрат.

Благодарности: Това изследване се осъществява с финансовата подкрепа на Фонд за научни изследвания, Договор № КП-06-Д002/4 от 22.06.2022 г.

3D ПРИНТИРАНЕ НА ПОЛИМЕРНИ МИКРОИГЛИ

Теодора Димитрова, Марин Симеонов, Елена Василева

Лаборатория по структура и свойства на полимерите, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучер 1, 1164, София, България, dimtedy@gmail.com

3D принтирането е процес на изграждане на триизмерни обект(и) от дигитален модел посредством отлагането на голям брой последователни тънки слоеве от даден материал. В зависимост от типа на 3D печата и вида на отлагания материал 3D принтерите предоставят различни възможности за постигане на дадено ниво на детайлност, функционалност, биосъвместимост и като цяло за приложение на 3D печата за получаването на различни биомедицински изделия.

Микроиглите са средство за трансдермално доставяне на терапевтични агенти. Те представляват масив от игли с дължина от порядъка на 50 – 120 μm . Това им дава възможност да преодолеят роговият слой на епидермиса (Stratum corneum) и да достигнат до дермата, без да засягат рецепторите за болка. Така преодоляват кожната бариера и предоставят възможност за пасивна дифузия и вътреклетъчно проникване, постигайки терапевтични концентрации на терапевтичния агент. Параметри като форма, размери, вътрешна структура, а така също и материала, от който са изградени, разкриват широко поле от възможности за доставяне на лекарствени вещества с предизвикателни физикохимични и терапевтични профили.

Целта на настоящото изследване е разработване на полимерни микроигли с помощта на 3D печат. За целта са разработени няколко дигитални модела на масиви от микроигли, които се различават по форма, размер, гъстота и вътрешна структура на микроиглите. От получените модели са принтирани микроигли с помощта на два типа 3D принтери – FDM (Fused deposition modeling) и MSLA (Masked stereolithography apparatus). Получените микроигли са изследвани с помощта на оптична микроскопия и е оценена възможността на двата типа 3D печат за получаването на микроигли с необходимото ниво на детайлност, функционалност и здравина.

Благодарности: Това изследване е реализирано с финансовата подкрепа на Министерство на образованието и науката, програма Европейски научни мрежи, проект D01-76/30.03.202.

ON THE ZWITTERIONIC TRIPEPTIDE Arg-Gly-Asp (RGD) FOR CANCER THERANOSTIS

V. T. Georgieva¹, P. D. Kushaev², N. G. Georgieva¹, G. S. Georgiev¹

¹University of Sofia, Faculty of Chemistry and Pharmacy, Laboratory of Water-Soluble Polymers, Polyelectrolytes and Biopolymers; ² University of Zurich, Faculty of Biotechnology

Recently it was established the crucial importance of zwitterionic tripeptide Arg-Gly=Asp (RGD) for the integrin interaction with their native ligands (extracellular signaling proteins, such as fibronectin, vitronectin, fibrinogen, containing RGD). Integrins are heterodimeric proteins composed of two subunits (α and β ; 18 α subunits and 8 β subunits in humans) which come together to create different integrin pairs with specific receptor active centers to RGD. Three domains (extracellular, transmembrane and cytoplasmic tail) compose each integrin [1]. The extracellular one contains a ligand-binding head region, a single-pass transmembrane domain provides the integrin penetration through the cell membrane, and a cytoplasmic tail interacts with intracellular signaling molecules. The second (maybe more important) invention for the initiation of the RDB target therapy was the established considerable overexpressing of RDL motifs in extracellular signaling proteins on the surfaces of cancer cells. The both inventions underline the importance of RGD-integrin interaction for cancer cells and open the wide possibilities for RGD target cancer theranostics. In fact, it was established experimentally the close relationship between the type of cancer cells (melanoma, glioblastoma, breast, prostate, ovarian malignancies, etc) and that of the integrin receptors for RGD. The number of these receptors are more than hundred and noted as $\alpha_i \beta_j$ (i, j are the number of the corresponding receptor subunits, $i \leq 18, j \leq 8$). For instance, RGD interaction with $\alpha_v \beta_3$ and $\alpha_v \beta_5$ receptors (v – variable number) stop the creation of new blood vessels and restrain the tumor grow, while the RGD interaction with $\alpha_5 \beta_1$ receptor inhibit breast, lung and colon cell migration and metastasis formation. In addition, zwitterionic RGD tripeptide allow improving drug delivery efficiency also, and minimizing adverse effects on healthy tissues. It is noteworthy that the most usable now in clinical practice cancer theranostics method is a result of the combination of the RGD target interaction with $\alpha_1 \beta_3$ integrin receptor of cancer cells in a whole body with the ^{68}Ga positron producer - a high sensible registration radiotracer. The name of the method is Total Body ^{68}Ga RGD Positron Emission Tomography/Computer Tomography (TB- ^{68}Ga -RGD-PET/CT). Its main challenge is the mechanism. Its main challenger is the mechanism of RGD interaction with cancer cell receptor. There is not up to now the theory for it.

Different hypothesis were developed to this aim. The general (classical) one is that this multistep process starts with the RGD motif binding to the α subunit of the ligand active center. This binding originates conformation changes in the integrin macromolecules, leading to the exposure of their high affinity states. The common conformational changes leads to the formation of the focal adhesion on the cell extracellular matrix and initiate the downstream signaling events in a cell cytosol. Many of steps of this complex mechanism are not proved experimentally. In addition, this hypothesis is not in a compliance with a famous zwitterionic antifouling effect (formation of a common focal adhesion center). Therefore, a new mechanism is proposed in the communication proposed. It is based on the emergent phenomena, introducing the supernetworks in the analysis of the complex processes [2]. In the discussed case each protein macromolecule after hydration forms a specific network. The fusion of these three networks results in new supernetwork with new, quite different structure hierarchy and dynamic characteristics in comparison with those of the initial ones. Just, these new supernetwork properties are responsible for a lack of an antifouling effect and variety RGD-target interaction with different cancer cells. The investigation of the emergent in the RMG-target cancer theranostics is a final proposal of this proposal.

1. Banhier, F., La Breton A., Pread V., RGD-based strategies to target $\alpha\beta$ integrin in cancer therapy and diagnosis, Mol. Pharm.,9(11), 2961, 2012.

2. P. W. Andersen, Science, More is different, 122, 4617, 1072.

FLOCCULATION ACCELERATED BY THE INTERVAL SUSPENSION ADDITION

N. G. Georgieva, V. T. Toncheva, G. S. Georgiev

University of Sofia, Faculty of Chemistry and Pharmacy, Laboratory Water-Soluble Polymers, Polyelectrolytes and Biopolymers, Sofia-1164, J. Bourchier Ave., 1

Among the different methods for suspension sedimentation, clarification and solvent purification the flocculation is preferred due its simplicity, facility, efficiency, low cost and flocculants accessible. As flocculants can be used bio- as well as synthetic polymers. In fact, flocculation is a formation of a network with suspension particles as network nodes and polymer chains as bonds between these nodes. There is a competition between monomer units adsorbed on the particle surfaces and those included in the bridges between particles. The first ones determine the sterical and electrostatical stability of suspension, while the bridges are responsible for good flocculation characteristics. On the basis of this comprehension it was interesting to test flocculation methods allowing to change the ratio between bridge (c_b) and adsorbed (c_a) monomer units (c_b/c_a) and influence of this ratio on the flocculation efficiency. To this aim the interval addition of suspension to the part of suspension with the total flocculant concentration was tested. There are two possibilities to change c_b/c_a ratio: by the change the number of the suspension additions and by the altering the frequency of these additions – changing the time for the equilibrium monomer unit adsorption on the suspension particles. As a tested suspension a grape (Racitelli) must was chosen, while as a flocculant the poly(acrylamide-co-acrylic acid) with 0.26 mole fraction of the acid monomer units was used. Sedimentation rate was determined via the movement of the frontier between clear and turbid layers in the special measurement tubes. In all measurements the dependence between sedimentation rate and flocculant concentration are extremal – with maximum. The flocculation efficiency was determined as a ratio between the maximal rate and the corresponding flocculant concentration. It was established 2.5 fold increase of the flocculation efficiency at two steps must addition in comparison with the flocculation without the suspension split. This positive results confirms the hypothesis proposed and can be related to the increase of c_b/c_a after the introducing the fresh suspension particles with zero adsorbed flocculant monomer units. Furthermore, these fresh particles can be take a roll as new bridges.. Flocculation efficiency increases also at three step suspension addition. The results become too complex with the increasing of the number of suspension addition steps. These complexity can be related to the formation of the supernetworks with the increasing of the suspension addition steps. The primary analysis of this proposal was developed, together with Bayesian simulation of this complex network problem.

СЕКЦИЯ ОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Елена Милинова, ХФ - ПУ

Деница Бъчварова, ХФ - ПУ

Изабела Танева, ФХФ - СУ

Михаил Коларски, Stockholms Universitet

Мария Иванова, ФХФ - СУ

Илиан Димитров, ФХФ - СУ

Дона Саралиева, ФХФ - СУ

Натали Георгиева, ФХФ - СУ

Петър Бояджиев, ФХФ - СУ

Нора Ангелова, ХТМУ

Надежда Бозова, ФХФ - СУ

Стефа Бобова, Мария Бъчварова, ХФ - ПУ

Пламен Чорбаджиев, ИОХЦФ - БАН

СИНТЕЗ НА НОВИ БЕНЗАКАМАЛЕКСИНОВИ АНАЛОЗИ

Е. Милинова¹, Й. Стремски¹, М. Бъчварова¹, Д. Киркова², Ст. Статкова-Абегхе¹

¹Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, stu2005571018@uni-plovdiv.bg

²Институт по тютюна и тютюневите изделия – с. Марково, Пловдив 4000
Селскостопанска академия

Забележителната антитуморна, антимикробна и противовъзпалителна активност на имидазолони съединения в това число бис-индолиновите хибриди - *Нортонсенсин* A-D¹ мотивират разработването на методи за синтез на нови аналози. В предишни изследвания успешно е синтезиран *Азакамалексин*². Тук е оптимизирана подходяща процедура за получаването и изолирането на поредица Бензакамалексини.

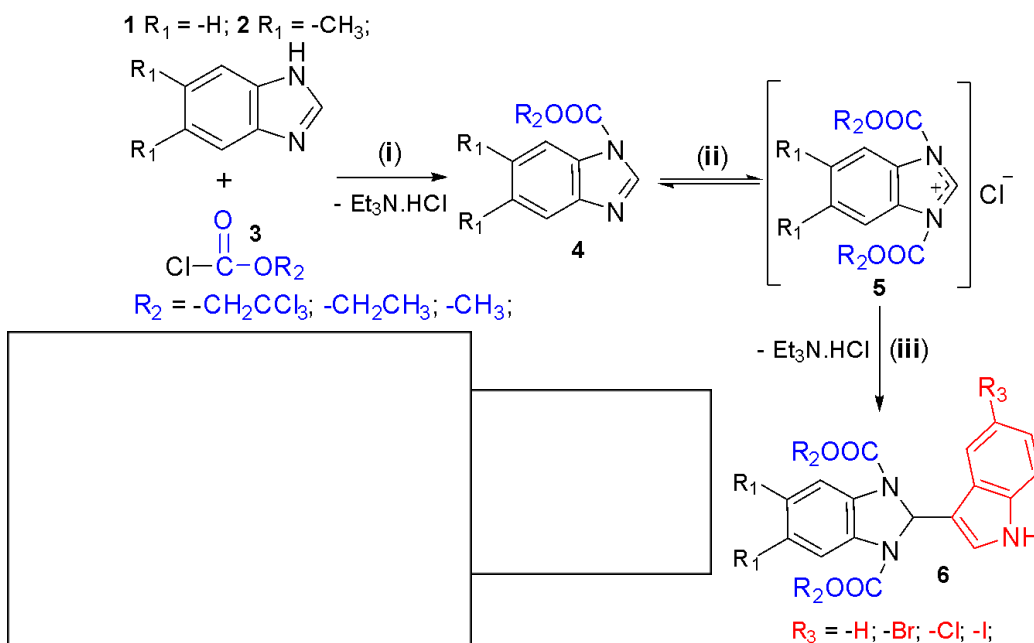


Схема 1. Синтез на *N,N*-диетоксикарбонил-3-индолил-бензимидазолини **6** чрез реакция на α -амидоалкилиране; (i) CH_2Cl_2 , Et_3N , 0 °C, 20 мин.; (ii) ClCOOR_2 , 0 °C, 20 мин.; (iii) Индол, Et_3N , 0-20 °C, 20-180 мин.

За синтеза на целевите молекули е приложен лесен *in situ* подход, включващ α -амидоалкилиране на халоген-съдържащи индоли с *N,N*-диацилиминиеви реагенти **5**, получени от бензимидазол и 5,6-диметил-бензимидазол **1**, **2** с алкилхлороформиати **3**. Установено е, че реакциите протичат успешно с получаването на целевите *N,N*-диацилирани бис-хетероциклени продукти **6**, нови аналози на Бензазакамалексин с високи добиви от 80% до 99% (**Схема 1**).

Благодарности: Изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на Дигитални устойчиви екосистеми – технологични решения и социални модели за устойчивост на екосистеми (ДУЕкос) на ПУ с договор ДУЕКОС BG-RRP-2.004-0001, Д23-ХФ-001.

1. M. Gaba, C. Mohan, *Medicinal Chemistry Research*, 25, 173-210, **2016**;
2. Y. Stremski, S. Statkova-Abeghe, P. Angelov, I. Ivanov, *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 7, 55, 1589-1595, **2018**;

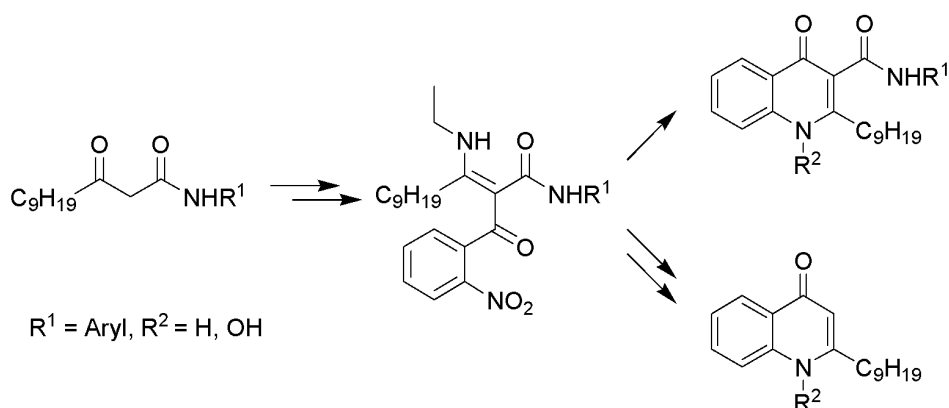
СИНТЕЗ НА АЛКАЛОИДА ПСЕУДАН IX И НЕГОВИ 3-КАРБОКСАМИДНИ ПРОИЗВОДНИ

Деница Бъчварова¹, Йорданка Сапунджиева¹, Пламен Ангелов¹, Богдан Горанов²

¹ Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, катедра
Органична химия, ул. „Цар Асен“ №24, Пловдив 4000, angelov@uni-plovdiv.bg

² Университет по хранителни технологии, катедра Биохимия, бул. „Марица“ №26,
Пловдив 4002

Осъществен е нов синтез на природното съединение Псеудан IX (2-нонил-4-хинолон). За целта е приложен оригинален четириетапен метод, изхождащ от фениламид на 3-оксододекановата киселина. Използването на различни амиди на 3-оксододекановата киселина в съкратен триетапен вариант на метода дава достъп до поредица нови 3-карбоксамидни производни на природното съединение. Новополучените вещества са изследвани за антибактериално действие и при някои от тях е открита значителна широкоспектърна активност.



Изследванията са проведени с финансовата подкрепа на Фонд „Научни изследвания“ - проект **КП-06-H59/14**.

НОВИ ПОТЕНЦИАЛНО БИОАКТИВНИ БЕНЗИМИДАЗОЛОВИ И ПИРАЗОЛИНОВИ ПРОИЗВОДНИ

Изабела Танева¹, Александър Стойков¹, Меглена Къндинска¹

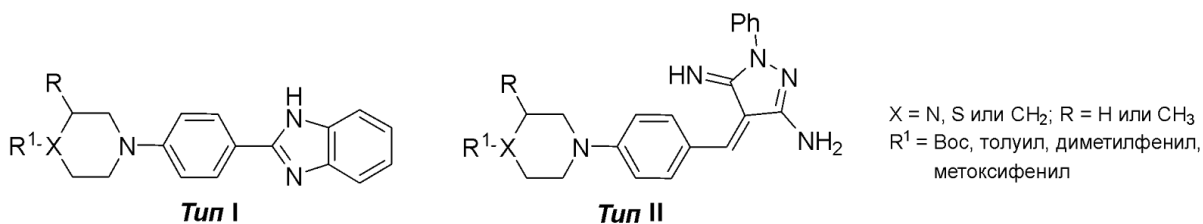
¹ СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра по органична химия и фармакогнозия, бул. „Джеймс Баучер“ No 1, София 1164 ibtaneva@gmail.com

Бензимидазоловата хетероциклена пръстенна система се свързва с проявата на широк спектър от биологично действие – противоязвено, антипаразитно, антимикробно, противовирусно, противораково, противовъзпалително, аналгетично.

Бензимидазоловото ядро участва в структурата на витамин В12 и на прилагани в медицинската практика антибактериални и противогъбични средства. Налично е в широко използвани антихелминтни лекарства като *Албендазол*, *Мебендазол* и *Тиабендазол*.

2-Пиразолиновият хетеропръстен е фрагмент, присъстващ в структурата на редица важни лекарствени молекули като *Ибипинабант*, *Акситиниб*, *Антипирин*, *Рамифеназон* и др.

Като обещаващи фармакофори при разработването на нови съединения с висок потенциал за проява на биологична активност, бензимидазолът и пиразолинът бяха хетероциклените фрагменти от интерес при дизайна на техните заместени производни от **Tun I** и **Tun II**.



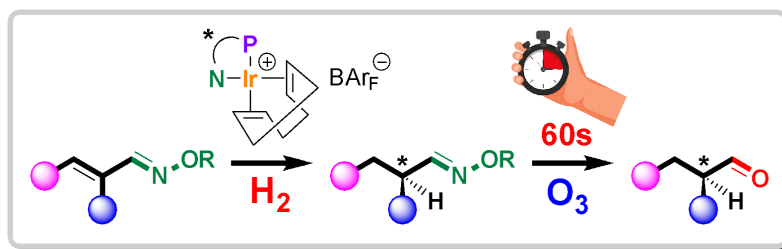
Последните синтезирахме посредством реакции на кондензация с участието на 4-заместени бензалдехиди и различни нуклеофилни реагенти. В резултат от проведените изследвания изолирахме с високи добиви и чистота двадесет нови съединения – девет бензимидазолови производни от **Tun I** и единадесет пиразолина от **Tun II**.

Благодарности: Изследванията са реализирани с финансовата подкрепа на проект 80-10-6/29.03.2024 г. Към ФНИ на СУ „Св. Кл. Охридски“

ИРИДИЙ-КАТАЛИЗИРАНО АСИМЕТРИЧНО ХИДРОГЕНИРАНЕ НА НЕНАСИТЕНИ ОКСИМОВИ ЕТЕРИ КАТО ПОДХОД ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА ХИРАЛНИ АЛДЕХИДИ

Михаил Коларски¹, Зейнаб Алсаман¹, Брам Б. К. Петерс¹, Пер Г. Андерсон¹

¹*Stockholms Universitet, Institutionen för Organisk Kemi, SE-106 91, Svante Arrhenius väg 16C, 114 18 Stockholm, Sweden, miko4299@student.su.se*



Каталитичното асиметрично хидрогениране използва преходни метали като родий, рутений или иридий и успява с помощта на хирални лиганди да индуцира асиметрия с отлични добиви, реактивност и селективност в широк набор от прохирални субстрати. Самата реакция се нуждае от малки количества катализатор и притежава пълна атомна ефективност. През 2001 година половината Нобелова награда за химия се връчва именно на Кноулс и Нойори за техния принос към развитието на асиметричното хидрогениране.¹

През последните няколко десетилетия иридиевите катализатори са се доказали като неизменна част от провеждането на асиметрично хидрогениране. Започвайки като катализатори, които успешно редуцират изолирани олефини с добра селективност, разработването на нови и по-ефективни лиганди вече позволява да се използват и за редуцията на функционализирани олефини като ненаситени естери, амиди, киселини, кетони, сулфони, алилови алкохоли и други. В тази поредица от широка толерантност към периферни функционални групи се отличават ненаситените алдехиди. Понастоящем те са предизвикателство за редуцирането им до алфа- или бета-хирални алдехиди.² В настоящия доклад се изследват трудностите пред директната редукция на ненаситените алдехиди и е предложен подход включващ редукция на ненаситени оксимови етери, получени от съответните им алдехиди. Докладът включва още синтез на редица нови оксимови производни, както и тяхното асиметрично хидрогениране. Като метод за възстановяване на алдехидната група със запазване на внедрената хиралност е предложено бързо озонолитично разкъсване на въглерод-азотната връзка.

Цитати

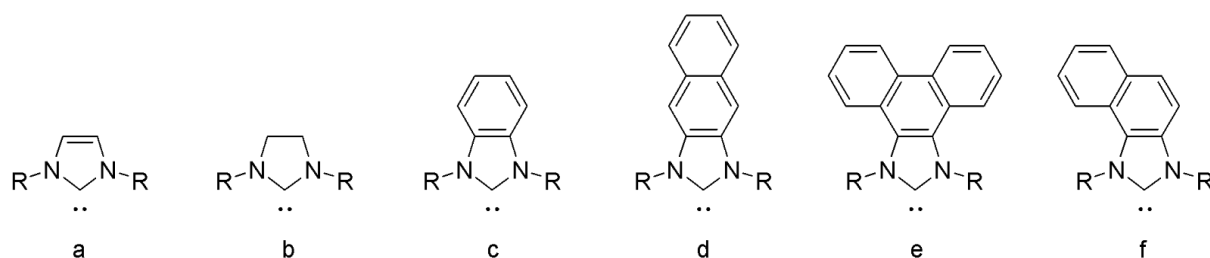
1. (a) Knowles, W. S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 1998. (b) Noyori, R. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 2008.
2. (a) Margarita, C.; Andersson, P. G. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 1346. (b) Verendel, J. J.; Pàmies, O.; Diéguez, M.; Andersson, P. G. *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 2130-2169. (c) Krajangsri, S.; Wu, H.; Lie, J.; Singh, T.; Andersson, P. G. *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 3649-3653.

СИНТЕЗ НА НАФТО-1,2-ИМИДАЗОЛИЕВИ СОЛИ И НЯКОИ ТЕХНИ ПРОИЗВОДНИ

Мария Иванова¹, Димитър Шандурков¹, Румен Ляпчев¹

¹СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
бул. „Дж. Баучер“ 1, София, maria.ivanova15@gmail.com

Най-добре изучените N-хетероциклени карбени и съответно, карбенови комплекси, са производни на имидазолилидените (a) и дихидроимидазолилидените (b):

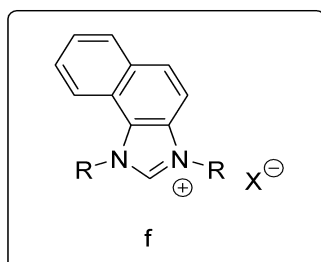


Структурата на този тип карбени позволява настройката на стеричните свойства на лиганда чрез вариране на заместителя R, но настройката на електронните свойства е по-трудна. От друга страна спецификите на синтетичните процедури за получаването им водят до синтез и използване на симетрични карбенови лиганди с еднакви заместители R. Тази особеност често може да се окаже пречка, когато поставените цели налагат употребата на лиганди със специфични стерични свойства и симетрия.

Кондензирането на имидазоловия пръстен с ароматна система води до промяна в електронните свойства на N-хетероцикления карбен. Известни са карбени, при които петчленният пръстен е кондензиран със система с едно (c), две (d) или повече ядра (e). Такива N-хетероциклени карбени, притежават специфични свойства, различаващи се от тези на некондензираните. При всички тях, обаче, имидазоловият пръстен е разположен симетрично спрямо ароматната система.

Въпреки това разнообразие, имидазолиеви соли и карбенови производни, съответстващи на структура (f) са практически непознати.

Докладът ще представи многостъпковия синтез на нови нафто-1,2-имидазолиеви соли (f), както и на някои производни на съответстващите им N-хетероциклени карбени.



Благодарности: авторите изказват благодарност към договор 80-10-7 / 29.3.2024 г.

**СИНТЕЗ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА ФОСФОНИ КИСЕЛИНИ
ОТ 1,2-БЕНЗОКСАФОСФОРИНОВ ТИП С ПОТЕНЦИАЛНА
БИОЛОГИЧНА АКТИВНОСТ**

Илиан И. Димитров, Невена И. Петкова-Янкова, Ана И. Колева, Росица Д. Николова

*Софийски университет “Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация,
Катедра Органична химия и фармакогнозия, бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164 София,
e-mail: ilian_dimitrow@abv.bg*

През последните десетилетия интересът към синтез на фосфорорганични съединения нараства поради необходимостта от създаване на молекули с биологична активност, които да притежават оптимална разтворимост и пермеабилност. До момента са известни редица лекарствени препарати, съдържащи фрагмент на метиленбисфосфонова киселина в своята структура, които се използват в терапията на широк спектър от заболявания, като напр. золедренова киселина – инхибитор на костната резорбция, използван при остеопороза.

Възможността за функционализиране на ароматната система от кумаринов тип беше предпоставка да синтезираме серии от различни бензоксафосфоринфосфонови киселини с електрондонорни и електронакцепторни заместители в условията на реакцията на Кнъвенагел. По-нататъшното изследване на свойствата на тези вещества е определящо за предсказване на фармакокинетичното поведение на потенциални бъдещи лекарствени молекули. Липофилността и степента на йонизация на лекарственото вещество са пряко свързани с процесите на неговата абсорбция и дистрибуция в организма. Именно това предопределя лекарствената бионаличност и съответно терапевтичния ефект, тъй като биомембраните могат да бъдат преодоляни единствено от липофилни незаредени молекули. Изследванията ни са насочени и към определяне стойностите на константите на киселинна дисоциация и коефициента на разпределение на получените серии от фосфонови и 1,2-бензоксафосфоринови киселини.

Благодарност: Проект № 2877 НИС при СУ, КП-06-Н39/15 от 17.12.2019г – „Димерни кумаринови производни - синтетични подходи и квантово-химични изследвания“;

ИнфраMAT – Националната пътна карта за научна инфраструктура (ПМС № 354 от 29.06.2017 г.) – Министерство на образованието и науката (Договор Д01-155/28.08.2018);

Проект № 80-10-158/17.04.2024 г. от 10.05.2024 г. към СУ „Климент Охридски“.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРНО ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА МОСТОВО-СВЪРЗАНИ БИСКУМАРИНИ ОТ СТИЛБЕНОВ ТИП

Дона С. Саралиева, Невена И. Петкова-Янкова, Росица Д. Николова

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и
фармация, Катедра Органична химия и фармакогнозия, София,
бул. Джеймс Баучър 1, София 1164
e-mail: donasarialieva254@gmail.com*

Бискумарините са хетероциклени димери, при които с използване на мостови групи от различен вид (алифатни вериги, хетероцикли, имино групи и други) се свързват два кумаринови фрагмента. Техни представители са изолирани и охарактеризирани от различни растителни видове. Подобно на кумарините и при бискумарините са установени разнообразни биологични, фармакологични, фотохимични, фотофизични и агрохимични приложения. Доказани са и техните антикоагулантни, антиоксидантни, антитуморни и противогъбични активности. Интерес представлява инхибиторната активност към различни ензими, която не е добре изучена.

Настоящите изследвания са насочени към получаване на димери, при които кумариновите остатъци могат да бъдат свързани с различни по дължина мостове. Използвани са условията на реакция на Витиг, при което са синтезирани димерни производни, които могат да се причислят към стилбеновата група съединения. Структурата на новополучените вещества определя формиране на различни по размери кухини и възможности за комплексообразуване с метали. Използването на еднакви или различни кумаринови остатъци позволява да бъдат променени свойствата и характеристиките на димерните структури.

Авторите изказват благодарност на проект № 2877 НИС при СУ (ФНИ-КП-06-Н-39/15 от 17.12.2019 г.)

Инфрамат – Националната пътна карта за научна инфраструктура (ПМС № 354 от 29.06.2017 г.) – Министерство на образованието и науката (Договор Д01-155/28.08.2018);

Проект № 80-10-158/17.04.2024 г. от 10.05.2024 г. към СУ „Климент Охридски“.

СИНТЕЗ НА ДИХАЛКОГЕН-ЗАМЕСТЕНИ 1,8-НАФТАЛИМИДИ ЗА ПРИЛОЖЕНИЕ КАТО ЕЛЕКТРОДНИ МАТЕРИАЛИ

Натали Нинкова Георгиева¹, Моника Мутовска¹, Деляна Манасиева², Юлиан Загранярски¹

¹ Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски“, бул. Дж. Баучер 1, София 1164, natali.n.simeonova@gmail.com

² Българска академия на науките, Институт по обща и неорганична химия, ул. „Акад. Георги Бончев“, бл. 11, 1113 София

Дизайнът на органосерни материали с уникални редокс-свойства е научно предизвикателство както по-отношение на целенасочения синтез, така и на рационалния контрол на техните свойства като специфичен капацитет и потенциал. Органичните електродни материали притежават голямо структурно разнообразие, за което са характерни различни електрохимични свойства, те също имат редица недостатъци, като недостатъчно добър капацитет, ниско изходно напрежение, лоша проводимост или висока разтворимост.

С развитието на системите за съхранение на енергия няколко от ключовите показатели на органичните електродни материали трябва да бъдат подобрени преди да се стигне до тяхното практически приложение, включително специфичен капацитет, работен потенциал, пренос на електрони, цикличност, скорост на протичащите редокс процеси и коефициент на дифузия. Получаването на нови електродни материали на базата на *пери*-дихалкоген заместени 1,8-нафталимиди, като едни от най-обещаващите електродни материали, е обект на огромен научен интерес.

Създаването на нови познания върху реактивоспособността на специфични видове органични съединения спрямо Li^+ и Na^+ йони би спомогнало да се вникне по-задълбочено в механизма на редокс реакциите, протичащи при електрохимичното тестване на циклични халкоген-съдържащи съединения. Трябва да се отбележи, че за разлика от съществуващите Na/S батерии, които работят само при висока температура, органоселеновите и смесените дихалкогенидни електроди са способни да работят при стайна температура спрямо натрий. От тази гледна точка диселенидите са привлекателен обект на изследвания като нов клас катодни материали с обещаващи електрохимични характеристики при реакции както с Li^+ , така и с Na^+ йони, имащи потенциала да подобрят нашето основно разбиране за батериите.

НОВИ ХИНОЛИНОВИ ПРОИЗВОДНИ С ПОТЕНЦИАЛНА ПРОТИВОВИРУСНА АКТИВНОСТ

Петър Бояджиев¹, Меглена Къндинска²

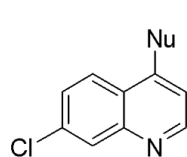
¹ СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра по органична химия и фармакогнозия, бул. „Джеймс Баучер“ No 1, София 1164 pgbhimiq@gmail.com

Хинолиновата пръстенна система присъства в структурата на редица фармакологично активни синтетични продукти или на такива с естествен произход. Поради това хинолиновият хетероцикъл и до днес е фармакофор от особен научен интерес, и е основен фрагмент при дизайна нови лекарствени средства с широк спектър на биологично действие.

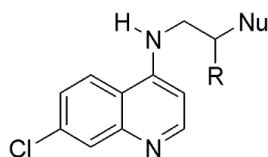
Като продължение на предходни наши изследвания, свързани с получаването на нови производни на хинолина с потенциална противовирусна активност, вкл. и срещу коронавирусни патогени, синтезирахме серия от нови съединения, съчетаващи в структурата си хинолинов пръстен и други хетероциклени азотсъдържащи фармакофорни групи.

Двата синтетични подхода, които приложихме, осигуриха получаването на директно заместени хинолини от **Tun I** на такива (**Tun II** и **Tun III**), в които варирахме разклонеността на алкиловия спейсър между двата хетеропръстена.

В резултат от проведените изследвания изолирахме дванадесет нови съединения, чиято структура и аналитична чистота потвърдихме с помощта на ЯМР- и масспектрални данни.

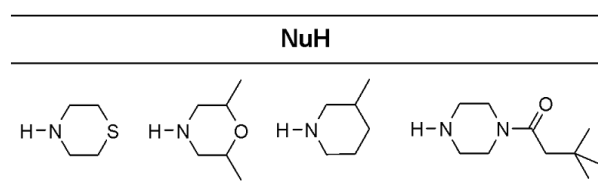


Tun I



Tun II (R = H)

Tun III (R = CH₃)



СИНТЕЗ НА НОВИ АНАЛОЗИ НА АНТИМИКРОБНИЯ ПЕПТИД АУРЕИН 1.2 И ИЗСЛЕДВАНЕ НА ВЛИЯНИЕТО НА ФЛУОР В АРОМАТНОТО ЯДРО НА ФЕНИЛАЛАНИН ВЪРХУ БИОЛОГИЧНАТА АКТИВНОСТ

Нора Ангелова¹, Емилия Найденова¹, Данчо Даналев²

¹ *Химикотехнологичен и металургичен университет, катедра „Органична химия“, София, бул. Климент Охридски 8, angelovanora@yahoo.com ; emilia@uctm.edu*
² *Химикотехнологичен и металургичен университет, катедра „Биотехнологии“, София, бул. Климент Охридски 8, ddanalev@uctm.edu*

През последните години мултирезистентните бактериални патогени се превръщат в световен проблем. Антимикробните пептиди (AMP) са все по-търсени и изследвани антимикробни агенти поради техните фармакологични свойства. Много антимикробни пептиди също действат като противоракови пептиди (ACP) [1]. Те имат способността да преминават през клетъчните мембрани и да унищожават бактерии и ракови клетки.

Aurein 1.2 (GLFDIIKKIAESF-NH₂) е къс многофункционален антимикробен пептид, изолиран от кожни секрети на жаби *Litoria aurea* и *L. raniformis*. Ауреиновите пептиди могат да бъдат класифицирани в пет различни групи (Ауреини-1 до -5), сред които Ауреин-1 пептидите се считат за едни от най-късите α -спирални пептиди с антимикробна и противоракова активност.

В настоящето изследване Ауреин 1.2 е избран като шаблон за рационална модификация за постигане на по-мощни биологично активни пептиди. Синтезирани са три нови аналози чрез заместване на Phe на 3-та и 13-та позиция последователно и едновременно с 4-флуоро-фенилаланин в първичната структура на Aurein 1.2. Въвеждането на флуор в ароматния пръстен има за цел да подобри фармакодинамиката на новите пептиди.

Получените нови аналози са тествани *in vitro* за цитотоксичност, фототоксичност и антипролиферативна активност върху панел от туморни и нормални клетъчни линии, с което се доказва положителното влияние на въвеждането на 4-флуоро-фенилаланин върху биологичната активност.

Цитати:

1. T. Rozek, K.L. Wegener, J.H. Bowie, I.N. Olver, J.A. Carver, J.C. Wallace, M.J. Tyler, The antibiotic and anticancer active aurein peptides from the Australian Bell Frogs *Litoria aurea* and *Litoria raniformis*. The solution structure of aurein 1.2, Eur. J. Biochem. 267 (2000) 5330–5341

АСИМЕТРИЧНИ МОНОМЕТИНЦИАНИНОВИ БАГРИЛА ЗА МАРКИРАНЕ НА НУКЛЕИНОВИ КИСЕЛИНИ И FID АНАЛИЗ

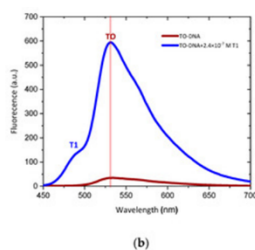
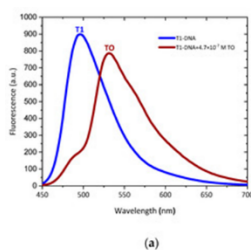
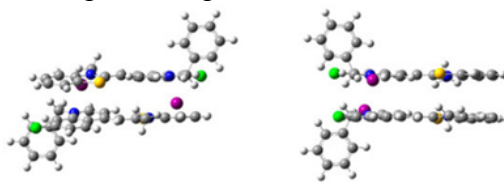
Надежда Бозова, Алексей Василев, Соня Илиева, Диана Чешмеджива

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

Детекцията на биомолекули се базира изключително на флуоресцентни методи. В наши дни флуорогенни багрила, аналози на тиазол оранж (ТО) намират приложение в редица биомедицински анализи като PCR, поточна цитометрия, лазерно сканираща конфокална микроскопия, флуоресцентна *in situ* хибридизация и др. Пандемията от COVID-19 утвърди PCR анализа като основен метод за бързо и точно откриване на инфекциозни патогени, което предполага увеличаване на производството на такива флуорогенни багрила. Поради тази причина разработването и използването на синтетични методи, съобразени с принципите на зелената химия, е от съществено значение по отношение на мащабния синтез на багрила като ТО и неговите аналози.

Широкото приложение на ТО и неговите аналози се дължи на факта, че те нямат собствена флуоресценция в молекулни разтвори, а силно увеличават флуоресценцията си при контакт с определени биоаналити.

Фотофизичните свойства на четири новосинтезирани багрила, аналози на ТО, са изследвани чрез комбинирано приложение на спектроскопски и теоретични подходи. Структурните характеристики на съединенията и образуването на димери е характеризирано чрез DFT изчисления.



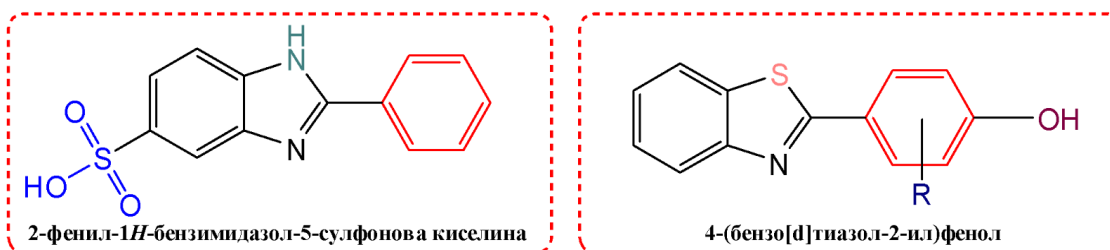
Афинитетът на свързване и начинът на взаимодействие на тези багрила с НК са оценени чрез флуоресцентно титруване, кръгов дихроизъм, молекулен докинг и метода на флуоресцентно интеркаляционно заместване (FID assay). Предложен е и нов референтен интеркалатор за FID анализ.

СВОЙСТВА НА МУЛТИФУНКЦИОНАЛНИ МОЛЕКУЛИ С ПОТЕНЦИАЛНО ПРИЛОЖЕНИЕ В КОЗМЕТИКАТА

Стела Бобова¹, Мария Бъчварова¹, Йордан Стремски¹, Мина Тодорова¹,
Стела Статкова-Абегхе¹

¹ Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, Катедра
Органична химия, ул. Цар Асен 24, Пловдив 4000, България, bychvarova@uni-plovdiv.bg

Откриването на слънцезащитни продукти с комбинирани фотозащитни, антиоксидантни и антимикробни свойства е предизвикателството за козметиката. За много бензимидазолови и бензотиазолови производни, съдържащи ароматен заместител на втора позиция са установени разнообразни биологични активности. Като допълнение на терапевтичните приложения на 2-заместените бензоазолови съединения, 2-Фенил-1*H*-бензимидазол-5-сулфонова киселина е търговски UVB-филтър с широко приложение в козметиката.



Целта е да се изследва *in vitro* слънцезащитният фактор (SPF) на серия синтетични 2-заместени бензоазолови съединения, структурни аналози на 2-фенил-1*H*-бензимидазол-5-сулфонова киселина (PBSA). Получените резултати биха дали възможност за тяхното приложение, като нови мултифункционални молекули и перспективни UV-филтри в козметиката.

Целевите мултифункционални молекули са получени успешно, чрез реакции на α -амидоалкилиране [1]. SPF факторът е установен, чрез адаптиран *in vitro* спектрофотометричен метод за изследване на UVB-филтърната активност [2].

Благодарности: Изследванията са проведени с финансовата подкрепа на ФНИ при ПУ „Паисий Хилендарски“, проект МУПД23-ХФ-003

Цитати:

- [1] Y. Stremski, D. Kirkova, S. Statkova-Abeghe, P. Angelov, I. Ivanov, D. Georgiev, *Synth. Commun.*, **2020**, 50(19), 3007-3015;
- [2] Mansur, J.S., Breder, M.N.R., Mansur, M.C.A., and Azulay, R.D., *An. Bras. Dermatol.*, **1986**, 61(3), 121–124.

ХИМИЧНО ПРОФИЛИРАНЕ НА ПШЕНИЧНИ БИРИ ЧРЕЗ ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ

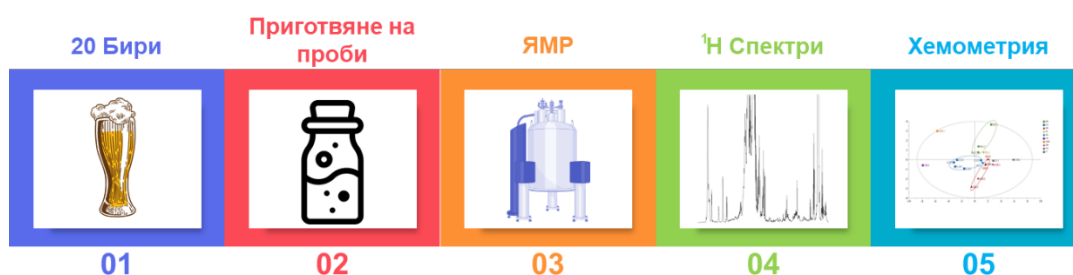
Пламен Чорбаджиев^{1,2}, Десислава Гергинова¹, Светлана Симова¹

¹ *Институт по органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките, 1113 София, България, plamen.chorbadzhiev@orgchm.bas.bg*

² *Химикотехнологичен и металургичен университет, 1756 София, България*

Пшеничната бира е пиво, което обикновено се произвежда с по-голямо количество пшеничен малц, отколкото ечемичен. Съвременният вариант датира от 1872 г., като производството е силно застъпено в регионите на Бавария - Германия и Фландрия - Белгия. С течение на времето са се появили отличителни стилове за всяка област, вариращи от лека и филтрирана пшенична бира до пиво, в което са добавени портокалови кори и кориандр.

Ние използвахме ЯМР спектроскопия за да определим химичния профил на 20 пшенични бири от 4 подвида – Hefeweizen, известна със своята утайка от дрожди, Dunkelweizen – тъмна пшенична бира, Kristallweizen – филтрирано пшенично пиво и Witbier, която се характеризира с наличието на подправки. Чрез хеометрични методи ние успешно разграничихме стиловете един от друг въз основа на техния химичен състав.



Благодарности: Проучването е финансирано от Фонд „Научни изследвания“, проект КП-06-M79/2 SHEERS. В тези изследвания е използвана апаратура от Разпределената научна инфраструктура ИНФРАМАТ, част от Националната пътна карта на България за научна инфраструктура, финансово подкрепена от Министерството на образованието и науката.

СЕКЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧНА ХИМИЯ

Люси Касъмова, ХФ - ПУ

Йоана Петрова, ХФ - ПУ

Валентин Петров, МУ - Плевен

Мартин Шарков, МУ - София

Даниел Йорданов, ФХФ - СУ

Дияна Димитрова, ХФ - ПУ

Кирила Йовчева, ФХФ - СУ

СИНТЕЗ НА НОВИ ХИБРИДНИ МОЛЕКУЛИ МЕЖДУ 2 - АМИНОБЕНЗОТИАЗОЛ И ПРОФЕНИ

Люси Касъмова¹, Станимир Манолов¹, Димитър Божилов¹, Йордан Стремски¹,
Илиян Иванов¹, Стела Статкова-Абегхе¹

¹ Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, катедра
Органична химия, ул. „Цар Асен“ №24, гр.Пловдив, 4000, manolov@uni-plovdiv.bg

Бензотиазолът и неговите производни са интересни органични молекули с широк спектър от биомедицински действия. Също така, през последното десетилетие функционализацията на бензотиазол генерира значителен брой потенциални хемотерапевтични агенти. Профените от своя страна са група важни биологично активни съединения, използвани основно като нестероидни противовъзпалителни лекарства. Те са известни със своите аналгетични и противовъзпалителни свойства и се използват широко за облекчаване на болка и възпаление при различни състояния, като например ревматизъм и артрит.

В тази връзка успешно бяха синтезирани пет нови биофункционални съединения **3a-e**, съдържащи в структурата си както 2-аминобензотиазол **1**, така и профенов фрагмент **2a-e** (Схема 1).

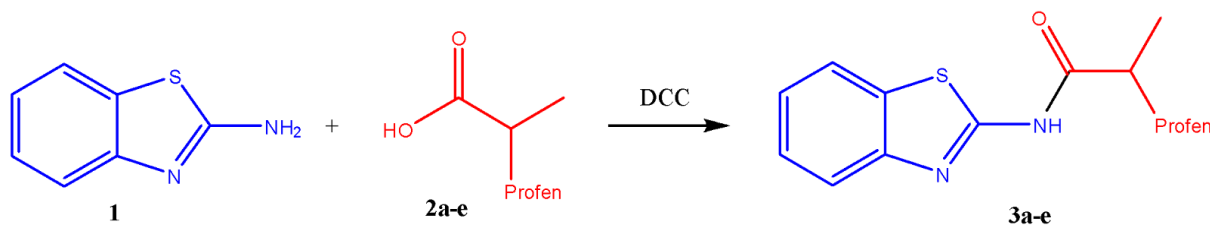


Схема 1. Синтез на нови хибридни съединения **3a-e**.

За тяхното получаване бе използвана синтетична процедура чрез използването на *N,N'*-дициклохексилкарбодиимид за активирането на профените и последващо свързване с 2-аминобензотиазол (Схема 1). Методът е добре познат в литературата в контекста на функционализиране на различни карбоксилни киселини и техни производни. Реакционните условия, включващи използване на DCC като свързващ агент, бяха модифицирани при синтезирането на различните съединения **3a-e**.

Благодарности: Настоящото изследване е извършено с финансовата подкрепа на Фонд „Научни изследвания“ към ПУ“Паисий Хилендарски“ с грант № ФП23-ХФ-005-2023, както и Фонд „Научни изследвания“ на МОН с грант № КПО6-М59/5-2021.

СИНТЕЗ НА НОВИ ПРОФЕН ФУНКЦИОНАЛИЗИРАНИ КЕТОАМИДИ

Йоана Петрова¹, Станимир Манолов¹, Илиян Иванов¹, Димитър Божилов¹, Пламен Ангелов¹

¹ Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет, катедра Органична химия, ул. „Цар Асен“ №24, гр.Пловдив, 4000, manolov@uni-plovdiv.net

1,3-Дикарбонилните съединения са универсални молекули, широко използвани в органичната химия и фармацевтичната индустрия поради техните уникални свойства и структурни особености. Във фармацевтичната индустрия 1,3-дикарбонилните съединения играят ключова роля като синтетични интермедиати при получаването на нови биофункционални молекули. Тяхната способност да участват в разнообразни химични трансформации позволява синтеза на лекарствени вещества с подобрена потентност, селективност и фармакокинетични свойства.

Проведени са изследвания за получаване на поредица нови β-кетоамиди съдържащи в структурата си профенов фрагмент, а именно ибупрофен, кетопрофен, флурбипрофен, напроксен и карпрофен. Чрез тристъпков синтетичен път успешно са получени пет нови кетоамиди, като първоначално бе получен енаминон чрез кондензирането на моно Вос-защитен етилендиамин с ацетоацетанилид (Схема1).

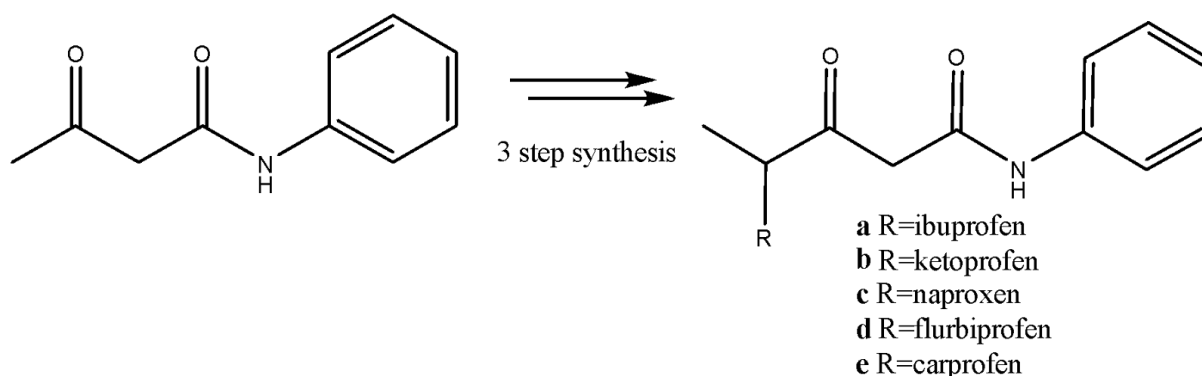


Схема 1. Синтез на нови кетоамиди съдържащи профенов фрагмент в структурата си.

Последващо ацилиране на енаминона с киселинните хлориди на профените, и домино фрагментиране на ацилираните енаминоамиди доведе до получаване на новите β-кетоамиди.

СИНТЕЗ, АНАЛИЗ И ОЦЕНКА НА БИОЛОГИЧНАТА АКТИВНОСТ НА НОВИ DPP-IV ИНХИБИТОРИ

Валентин Петров¹, Александрина Пешева¹, Александър Пъшев¹, Теодора
Александрова¹, Лидия Петрова², Милена Атанасова², Галя Ставрева¹, Георги Алтънков²,
Никола Бурджиев³

¹ Факултет „Фармация“, Медицински университет-Плевен,
ул. Св. Климент Охридски 1, 5800, Плевен, България,
e-mail: vali.petrov@abv.bg

² Факултет „Медицина“, Медицински университет-Плевен,
ул. Св. Климент Охридски 1, 5800, Плевен, България

³ Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“,
бул. Джеймс Баучър 1, София, България

Настоящото изследване е фокусирано върху синтеза и структурната оптимизация на нови дипептидил пептидаза-4 инхибитори (DPP-IVIs), съдържащи бензо[а]хинолизидинов фрагмент и оценка на тяхната биологична активност и цитотоксичност.

Методът на синтез на целевите съединения е базиран на реакция между енолизиращи се анхидриди и 3,4-дихидроизохинолинови производни. Разработени са методи за пречистване на някои междинни продукти от синтетичната методология. Структурите на крайните продукти са доказани с помощта на ЯМР, както и възможните диастереомерни и енантиомерни форми, произлизащи от хиралността на молекулата.

Инхибиторната активност на синтезираните вещества спрямо човешки DPP-IV е измерена използвайки Ситаглиптин като контролна субстанция. Цитотоксичността на всички съединения е тествана върху човешки мезенхимни стволови клетки.

Резултат от работата на екипа са успешно синтезираните две серии от съединения с различни заместители и хетероатоми, с умерени до високи добиви.

Няколко от синтезираните вещества показват инхибиторна активност в микромолярна концентрация, сравнима с тази на Ситаглиптин. Доказано е, че всички съединения не са цитотоксични в изследваните концентрации.

Тази методология дава възможност за синтезирането на нови хетероциклени съединения с потенциални фармакологични свойства.

Цитати:

1. Pashev A, Burdzhiev N, Stanoeva E. One-step route to tricyclic fused 1,2,3,4-tetrahydroisoquinoline systems via the Castagnoli-Cushman protocol. Beilstein J Org Chem. 2020 Jun 24;16:1456-1464

СИНТЕЗ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА СЕРИЯ ПИРОЛОВИ ПРОИЗВОДНИ СЪДЪРЖАЩИ ФРАГМЕНТ ОТ ДЕЛТА - АМИНОВАЛЕРИАНОВА (5-АМИНОПЕНТАНОВА) КИСЕЛИНА

М. Шарков¹, Е. Матеев¹, М. Георгиева¹, М. Кондева-Бурдина²

¹*Катедра Фармацевтична химия , Фармацевтичен факултет при Медицински университет – София*

²*Катедра Фармакология, фармакотерапия и токсикология , Фармацевтичен факултет при Медицински университет – София*

Наличието в литературата и лекарската практика на лекарствени препарати базирани на пиролов хетероцикл проявяващи разнообразна фармакологична активност като противовъзпалителна, антихиперлипидемична, антинеопластична, противотуберкулозна и други насочва интереса на изследователите към този клас хетероциклични съединения. Това определи и целта на настоящото проучване, насочена към синтез и охарактеризирани на серия неописани до сега в литературата пиролови производни базирани на кондензация на 1,4-дикарбонилно съединение с делта-аминовалериановата киселина. За получаване на целевите продукти бе използвана класическата Паал-Кнор кондензация с последваща естерификация и аминолиза на резултантната от кондензацията N-пиролил карбоксилна киселина. В резултат са синтезирани общо 12 нови съединения, включващи киселина, хидразид и десет хидразид-хидразона. Синтетичните процеси са оптимизирани, с цел повишаване на добива. Структурата на новополучените молекули е доказана чрез различни аналитични методи. Получените нови съединения ще бъдат подложени на различни фармакологични и токсикологични проучвания чрез *in vitro* и *in vivo* модели.

Форма на представяне: ДОКЛАД

СИНТЕЗ НА НОВИ, КОНФОРМАЦИОННО ПОДВИЖНИ, АНАЛОЗИ НА КОМБРЕТАСТАТИНИ С ПОТЕНЦИАЛНА ПРОТИВОТУМОРНА АКТИВНОСТ

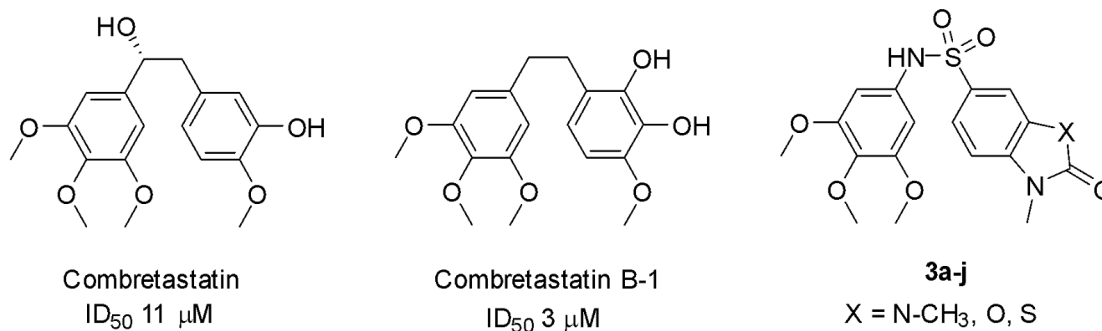
Даниел Йорданов, Огнян Петров

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

Установено е, че комбретастатините, които представляват вторични метаболити в растенията, имат полза в лечението на различни заболявания. Тези съединения имат антибактериални, антиоксидантни, противовъзпалителни и противотуморни свойства [1]. Редица проведени *in vivo* и *in vitro* проучвания разкриват комбретастатините, като обещаващи кандидати за разработването на нови противотуморни средства [2,3].

Цел на настоящата работа е синтез и охарактеризиране на нов клас комбретастатинови аналози с кондензиран в пръстен В азолов фрагмент. Избраната от нас синтетична схема се състои от 3 стъпки. Целевите съединения с обща формула **3**, бяха получени с добри добиви и структурата им беше доказана посредством ЯМР спектроскопия.

Предстои изследване на тяхната цитотоксичност по отношение на няколко туморни клетъчни линии и инхибирането на тубулиновата полимеризация.



Литература:

1. Akkal, A., Sanchez, E., Karatoprak, G., *Molecules*, 2020, 25, 2560
2. Seddigi, S., Malik, S., Lamfon, A., *MedChemComm*, 2017, 8, 1592-1603s
3. Pettit, G. R., Singh, S. B., Niven, M. L., Hamel, E., Schmidt, J. M., *J Nat. Prod.*, 1987, 50, 119-131.

ПОЛУЧАВАНЕ НА N-ФЛУРБИПРОФЕН ЗАМЕСТЕНИ 1,2,3,4-ТЕТРАХИДРОИЗОХИНОЛИНИ ЧРЕЗ РЕАКЦИЯ НА ВЪТРЕШНОМОЛЕКУЛНО АЛФА-АМИДОАЛКИЛИРАНЕ В УСЛОВИЯ НА МЕХАНОХИМИЧЕН СИНТЕЗ

Дияна Димитрова, Станимир Манолов, Илиян Иванов, Димитър Божилов

*Катедра Органична химия, Химически факултет, Пловдивски университет, „Паисий Хилендарски“, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, България,
diyanadimitrova@uni-plovdiv.bg*

Изохинолиновите алкалоиди са голяма група природни продукти, в които 1,2,3,4-тетрахидроизохинолинът (ТНІQ) е важен клас. Базираните на ТНІQ естествени и синтетични съединения проявяват разнообразна биологична активност срещу различни инфекциозни патогени и невродегенеративни заболявания.

В търсене на нови екологично чисти методи за синтез, надграждайки нашите дългосрочни изследвания на вътрешномолекулната реакция на α -амидоалкилиране, успешно е проведена реакцията при условия на механосинтез. Приложена е механично подпомогната вътрешномолекулна реакция на α -амидоалкилиране без разтворители за получаване на нови изохинолинови производни, съдържащи флурбипрофенов фрагмент. Предложеният от нас подход включва прилагането на PPA/SiO₂ като катализатор, който осигурява необходимата протонна среда за завършване на реакцията.

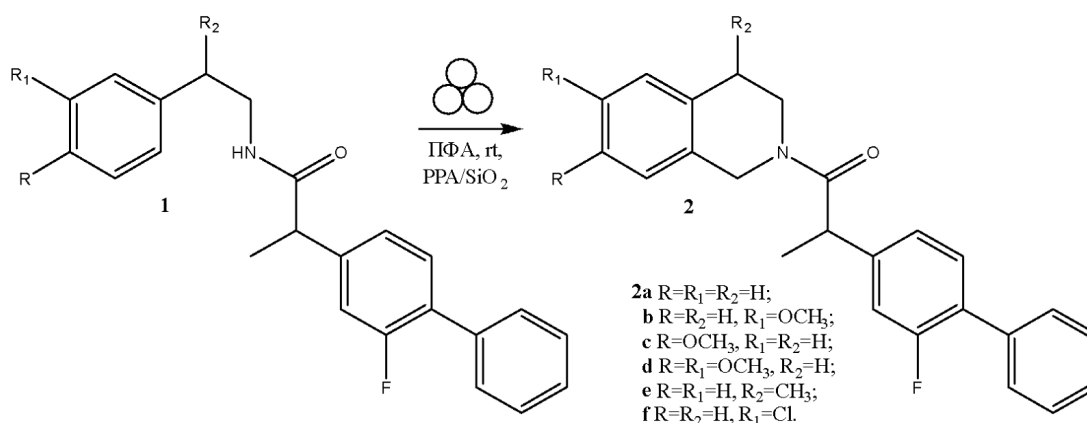


Схема 1. Синтез на N-флурбипрофен заместени 1,2,3,4-тетрахидроизохинолинови съединения в условия на механичен синтез.

Благодарности: Изказваме благодарност за финансовата подкрепа на Фонда за научни изследвания на Пловдивския университет, проект ФП23-ХФ-005.

ИЗЧИСЛИТЕЛЕН СКРИНИНГ ЗА ПОТЕНЦИАЛНИ АГОНИСТИ НА ГЛЮКАГОНОПОДОБЕН ПЕПТИД-1 РЕЦЕПТОР СРЕД ПРОИЗВОДНИ НА ЖЕНСКИ ПОЛОВИ ХОРМОНИ

Кирила Йовчева¹, Ралица Робева^{2*}, Юлия Романова¹, Marco Lattuada³, Васил Симеонов¹
и Мирослава Недялкова^{1,3,4*}

¹СУ “Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация, бул. Джеймс Баучер 1, 1164, София, България

²Катедра по ендокринология, Медицински факултет, Медицински университет – София, София, България

³Department of Chemistry, Fribourg University, Fribourg, Switzerland

⁴Swiss National Center for Competence in Research (NCCR) Bio-inspired Materials, University of Fribourg, Fribourg, Switzerland

e-mails: nhmn@chem.uni-sofia.bg и

miroslava.nedyalkova@unifr.ch; rali_robeyva@yahoo.com

Глюкагоноподобният пептид-1 (GLP-1) е стомашно-чревен хормон, който оказва своите плейотропни ефекти чрез специфичен GLP-1 рецептор (GLP-1R). Комплексът хормон-рецептор може да регулира глюкозо-зависимата инсулинова секреция и енергийната хомеостаза, а също така да намали възпалението и да осигури кардио- и невропротекция. Известно е, че благоприятното влияние на GLP-1 върху затлъстяването при жените може да доведе до подобряване на яйчниковата им функция. Връзките между метаболизма и репродукцията са тясно свързани и не е изненадващо, че различните естрогенни производни, селективни естрогенови рецепторни модулатори (SERM) и прогестините, използвани при гонадни и онкологични нарушения, могат да повлияят на въглехидратния и липидния метаболизъм. Възможното им влияние върху GLP-1R обаче не е проучено и това е цел на настоящото изследване.¹ За да я осъществим използвахме комбинация от изчислителни подходи (докинг, молекулна динамика, теория на функционала на плътността) и хемометрия. Теоретичното ни изследване показва, че поради уникалната си структура ралоксифенът може да оказва алостерично влияние върху GLP-1R сигнализацията, което може да допринесе за потенциални благоприятни ефекти върху метаболизма и регулирането на телото. В бъдеще са необходими допълнителни клинични проучвания, за да се разкрие дали модулацията на GLP-1R има реално благоприятно биологично въздействие.

Цитати:

1. M. Nedyalkova, R. Robeva, J. Romanova, K. Yovcheva, M. Lattuada, V. Simeonov, *J. Biomol. Struct. and Dynamics*, 2024, vol. 42, <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/38587907/>.

СЕКЦИЯ КАТАЛИЗ

Елжана Енчева, ФХФ – СУ

ЕФЕКТ НА Cu(II) ВЪРХУ КАТАЛИТИЧНИТЕ СПОСОБНОСТИ НА $\text{GdFe}_{1-x}\text{CuO}_3$ ЗА АКТИВИРАНЕ НА ПЕРОКСОМОНОСУЛФАТ

Елжана Енчева¹, Геновева Атанасова², Зара Черкезова-Желева³, Мартин Цветков¹

¹ *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,*

² *Институт по обща и неорганична химия –БАН, ул. „Акад. Георги Бончев“ бл. 11*

³ *Институтът по катализ –БАН, ул. „Акад. Георги Бончев“ бл. 11
eencheva97@gmail.com*

През последните няколко десетилетия бързото промишлено развитие и нарастването на човешката популация води до значително замърсяване на водите. Един от най-сериозните проблеми е замърсяването на води с органични замърсители (като оцветители, антибиотици, козметични продукти и др.), които са стабилни и това им позволява да се задържат в екосистемите за дълго време. Традиционните биологични, химически и физически методите не са в състояние напълно да премахнат тези органични съединения или водят до значително натрупване на вторични замърсители.

Усъвършенстваните процеси на окисляване (АОР) от скоро се разглеждат като една от най-обещаващите технологии, от които тези, базирани на сулфатни радикали (SR-AOP) показва отлични способности за минерализиране на органични замърсители във води. Някои от техните предимства са способността да образуват множество неселективни реактивни кислородни видове (ROS), активни в широк диапазон на рН. Въпреки това намирането на подходящ катализатор за SP-AOP не е тривиална работа. Предмет на подобни изследвания са композитни материали, базирани на перовските от типа ABO_3 . От решаващо значение е да се развият икономични и подходящи технологии за ефективно получаване на композитни материали с желаните свойства.

В тази работа серия от катализатори на базата на перовскит с общи формули на $\text{GdFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$ синтезирани по модифицирания метод на Печини. Въвеждането на Cu^{2+} йона в структурата води до генериране на различни видове дефекти в кристална структура. Материалите са охарактеризирани с XRD, XPS, UV-VIS и Mossbauer spectroscopy. След това катализаторите са тествани за активиране на пероксимоносулфат във Фентано-подобна реакция за разграждане на органични замърсители. Тествано е влиянието на водната матрица върху каталитичния процес и на база серията от експерименти е предложен реакционен механизъм.

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

СЕКЦИЯ АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ

Николай Петков, ФХФ – СУ

Николай Даскалов, ФХФ – СУ

СРАВНИТЕЛЕН АНАЛИЗ НА ВИБРАЦИОННИТЕ СПЕКТРИ НА МОНЕНЗИН И НЕГОВИ КООРДИНАЦИОННИ СЪЕДИНЕНИЯ

Николай Петков, Ивайла Панчева-Кадрева

Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Кл. Охридски“

бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164 София

ahnp@chem.uni-sofia.bg, ahip@chem.uni-sofia.bg

Вибрационната спектроскопия е успешно наложил се метод за структурен анализ при охарактеризирането на неорганични и координационни съединения. Двата основни клона, които се развиват, са взаимно допълващите се инфрачервена и раманова спектроскопии. Те са приложими при анализ начина на свързване в първата координационна сфера при комплексите и при изследване на водородни връзки, които може да окажат значително въздействие върху стабилизирането на молекулите на лигандите/комплексите чрез вътрешно- или междумолекулни взаимодействия.

Монензин (MonH) е представител на полиестерните йонофори – клас съединения, които са обект на изследване от десетилетия, но липсва детайлен анализ на техните вибрационни спектри. Причина за това е сравнително сложната структура на антибиотиците, която води до реализиране на множество преходи, които се регистрират. Поради трудностите, свързани с получаване на кристални образци, често пъти единствен начин да „надникнем“ в „личния живот“ на едно ново съединение, е използването на спектрални методи, основно място сред които заема инфрачервената спектроскопия.

Настоящото изследване обобщава данните от вибрационните спектри на монензин и негови комплексни съединения. Използван е комбиниран подход – извършена е серия от молекулно-динамични симулации в разтвор, която служи като отправна точка за генериране на структури, чиято геометрия да бъде оптимизирана, и съответно – да бъдат пресметнати вибрационните спектри. Сравнение е направено и с изчислените спектри на известните кристални структури. На база получените резултати са описани някои явления и зависимости, които могат да бъдат използвани при бъдещи изследвания не само на съединения от групата на йонофорите, но и на карбоксилните киселини и техните координационни съединения.

Благодарности: Това изследване е финансирано от Европейския съюз - NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект SUMMIT BG-RRP-2.004-0008-C01 ((№ 70-123-186).

АНАЛИЗ И ВАЛИДИРАНЕ НА МЕТОД ЗА КОЛИЧЕСТВЕНО ОПРЕДЕЛЯНЕ НА МОМЕТASONE ОТ ТВЪРДИ ЛИПИДНИ НАНОЧАСТИЦИ

Николай Даскалов, Христо Цачев

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

Твърдите липидни наночастици (SLN) са нова лекарствена форма с голям потенциал за насочено доставяне на лекарства и намалена токсичност. SLN предлагат някои от предимствата на полимерните наночастици, мастните емулсии и липозомите, заедно с възможността успешно да решават проблеми, свързани с физическата и химическата стабилност на лекарствата и при запазена или подобрена ефикасност. Ефективността на натоварването е основен параметър на лекарствената форма и се влияе от характеристиките както на помощните вещества изграждащи частицата, така и на активната фармацевтична съставка (API). Липофилните API предпочитат да се разпределят в липидните частици и имат типично по-високо натоварване. Капацитетът за натоварване с лекарство е друг параметър, който изразява количеството лекарство в частиците, разделено на теглото на цялата носеща система. Локализацията на лекарството може да повлияе на освобождаването на лекарството, с възможни локализации:

- Лекарството е равномерно разпределено в липидната наночастица
- Локализация на лекарството в повърхностните слоеве
- Локализация на лекарството в ядрото

Целта на проведеното проучване е проследяване на натоварване на липидни наночастици с моделни активни вещества и предварителна оценка за разпределението в тях, за целта е използвана високоефективна течна хроматография (HPLC) с различни протоколи за екстракция. Проучването е завършено с аналитично валидиране за параметрите линейност, специфичност, правилност, възпроизводимост. На база получените резултати се тълкува разпада на API при получаване и съхранение на лекарствената форма.

СЕКЦИЯ ХИМИЧНИ И ФАРМАЦЕВТИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ

Владимир Петков, ФХФ – СУ

Поля Иванова, ФХФ – СУ

Йордан Съйков, ФХФ – СУ

Лора Манова, ФХФ – СУ

Христина Мирчева, ФХФ – СУ

Теодор Боянов, ФХФ – СУ

Ралица Узунова, ФХФ – СУ

Диана Ковачева, ФХФ – СУ

Татяна Славова, ФХФ – СУ

Маноела Алексиева, ФХФ – СУ

Александра Тодорова, ФХФ – СУ

Мира Алипиева, ФХФ – СУ

Стефани Паскова, ФХФ – СУ

Вяра Йорданова, ФХФ – СУ

Георги Георгиев, ФХФ – СУ

Никола Генчев, ФХФ – СУ

СТАБИЛИЗИРАНЕ НА ПРЕСИТЕНИ РАЗТВОРИ НА ГЛИБЕНКЛАМИД С ПОМОЩТА НА ЦЕЛУЛОЗНИ ПОЛИМЕРИ

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 растворимост 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 аморфни твърди дисперсии на глибенкламид с различни целулозни полимери (HPC, HPMCAS). Както и способността и механизма по който целулозните полимери стабилизират преситените разтвори на лекарството и инхибират процеса на кристализация.

Всички системи приготвени, чрез разпръсквателно сушене, показват подобрен профил на разтваряне, в сравнение с кристалното вещество, чиято растворимост 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 подобрене е отбелязано при формулировката съдържаща HPMCAS. При системата, съдържаща чист, аморфен глибенкламид, без полимер, се наблюдава кристализация на лекарството при контакт с водна среда, поради което измерените концентрации са ниски. Когато в средата, присъстват полимери, процесът на кристализация може да бъде инхибиран съществено, като полимерът е способен да инхибира преструктурирането на лекарствените молекули в аморфните частици до кристали. Най-силно потискане на кристализацията се наблюдава при добавяне на HPC с ниска молекулна маса, като ефектът е по-изразен, когато полимерът 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.

Благодарности: 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“.

Цитати:

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.

РАЗРАБОТВАНЕ НА АМОРФНА ФОРМА НА ГЛИБЕНКЛАМИД НА БАЗАТА НА ХИДРОКСИПРОПИЛМЕТИЛ ЦЕЛУЛОЗА

Поля Иванова, Владимир Петков, Захари Винаров

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

Важен аспект във фармацевтичната индустрия е производството на лекарствени продукти с висока бионаличност. Един от подходите за подобряване на оралната бионаличност на лекарствени вещества с ниска водна разтворимост е превръщането им в аморфни твърди дисперсии, които представляват аморфно лекарствено вещество, диспергирано в полимерен носител. Стабилността на аморфното състояние на лекарството както и неговото разтваряне в стомашно-чревните течности зависи силно от полимера.

Целта на изследването е да разберем как молекулната маса на хидроксипропилметил целулоза (ХПМЦ) влияе върху свойствата на аморфни форми на глибенкламид (ГЛБ). За целта, чрез разпръсквателно сушене бяха разработени аморфни твърди дисперсии на ГЛБ, стабилизирани от ХПМЦ с различна молекулна маса: 10, 22 и 90 kDa. Профилът на разтваряне беше изследван в моделни стомашни-чревни течности, а концентрацията на ГЛБ беше измерена чрез високоефективна течна хроматография. Твърдото състояние беше изследвано чрез поляризирана оптична микроскопия, диференциална сканираща калориметрия и рентгено-структурен анализ.

Резултатите показаха, че най-стабилна във времето е аморфната твърда дисперсия с ХПМЦ 10 kDa, при тази с ХПМЦ 22 kDa се наблюдават промени, а с ХПМЦ 90 kDa се наблюдава пик на кристална форма на ГЛБ. Значима разлика в измерената концентрация на ГЛБ в бикарбонатен буфер, използван в състава на чревните течности, не се наблюдава спрямо ХПМЦ 10 kDa и ХПМЦ 22 kDa. При замяна на бикарбонатен с фосфатен буфер, част от пробите с ХПМЦ 22 kDa се утаяват. Добавянето на аморфен ГЛБ към предварително разтворен полимер показва достигане на постоянна концентрация ГЛБ в присъствие на ХПМЦ 10 kDa, докато с ХПМЦ 22 kDa с времето тя намалява. В заключение, ХПМЦ с по-ниска молекулна маса е по-подходящ носител за разработване на аморфна форма на ГЛБ, поради по-високата стабилност и доброто разтваряне на ГЛБ.

Благодарности: Авторите изказват благодарност на проект № КП-06-ДВ-3 от 15.12.2021 г. (3D-GUT) към Фонд „Научни изследвания“, МОН, ННП "ВИХРЕН-2021" за финансовата подкрепа и на проект BG05M2OP001-1.002-0012 по ОП НОИР за използването на научната инфраструктура.

ИЗСЛЕДВАНЕ НА АГРЕГАЦИЯТА ЦЕЛУЛОЗНИ ПОЛИМЕРИ В ИЗКУСТВЕНИ ЧРЕВНИ ТЕЧНОСТИ

Йордан Сърков, Владимир Петков, Захари Винаров

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

Полимерите са широко използвани помощни вещества във фармацевтичната технология, като едно от приложенията им е при разработването на аморфни форми на орални лекарства с ниска разтворимост във вода. Основна функция на полимера в тези състави е да инхибира кристализацията в преситените разтвори, получени след разтваряне на аморфното лекарство в стомашно-чревните течности. Механизмите на инхибиране на кристализацията от преситени разтвори все още не са напълно изяснени.

В настоящето проучване сме изследвали критичната концентрация на агрегация (ККА) на 3 вида хидроксипропилметил целулоза ацетат сукцинат (HPMCAS-LG, HPMCAS-MG, HPMCAS-HG) – един от най-широко използваните полимери при индустриалното разработване на аморфни твърди дисперсии. Експериментите са проведени в фосфатен буфер, както и в две системи симулиращи състава на чревните течности на гладно и след хранене, с цел да се наблюдават потенциални взаимодействия между полимера и повърхностно активните вещества (жлъчни соли и фосфолипиди) в тези течности. Определянето на ККА е извършено чрез лазерно светоразсейване.

Получените резултати за ККА в чревни течности са в добро съгласие с данните от литературата за ККА на тези полимери във водна среда. При системите симулиращи състоянието на гладно резултатите показват образуването на агрегати, които са по-големи от тези, които се наблюдават в тези симулирани течности в отсъствие на полимер. В същото време, в системите симулиращи състоянието след хранене се наблюдават ясно две популации агрегати, когато концентрацията на полимера е над ККА.

Получените резултати за агрегацията на HPMCAS в изкуствени чревни течности могат да допринесат за по-доброто разбиране на механизма на инхибиране на кристализацията от преситени разтвори на лекарства.

Благодарности: Авторите изказват благодарност на проект № КП-06-ДВ-3 от 15.12.2021 г. (3D-GUT) към Фонд „Научни изследвания“, МОН, ННП "ВИХРЕН-2021" за финансовата подкрепа.

ВЛИЯНИЕ НА ПОМОЩНИТЕ ВЕЩЕСТВА ВЪРХУ ОСВОБОЖДАВАНЕТО НА ФЕНОФИБРАТ ОТ ЛИПИДНИ ФОРМИ

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 ефектът 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 носители. Кинетиката на освобождаване на фенофибрат е изследвана в *in vitro* модел, имитиращ условията в стомаха и тънките черва. За поддържане на рН в чревната фаза е използван бикарбонатен буфер. Концентрацията на солюбилизирания фенофибрат в мицелите на жлъчни киселини е определена чрез високо-ефективна течна хроматография, а процесите в хода на кинетиката са наблюдавани под оптичен микроскоп.

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 ($\approx 650 \text{ ug/mL}$), поради образуване на смесени мицели с висок солюбилизационен капацитет от носителя и жлъчните соли. 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, Pecscol, 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.

Заклучения: Видът на използвания носител влияе съществено 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).*

ИН ВИТРО ИЗСЛЕДВАНЕ НА ЕНЗИМНОТО РАЗГРАЖДАНЕ НА ЛЕКАРСТВА В ЧРЕВНИ ТЕЧНОСТИ СЛЕД ХРАНЕНЕ

Христина Мирчева, Захари Винаров

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

Лекарства за перорална употреба, съдържащи естерни връзки, могат да бъдат ензимно хидролизирани в чревни условия, което може да окаже влияние върху тяхната ефективност и безопасност. Поради липсата на стандартизиран протокол за изследване на ензимното разграждане на лекарства, проведохме сравнително изследване на действието на два типа ензимни източници от свински произход (екстракт от панкреас и изолат от естераза) върху разграждането на Cortisone Acetate (CA), Prednisolone Acetate (PA), Tenofovir Disoproxil Fumarate (TDF) и Candesartan Cilexetil (CC) в условия имитиращи средата в тънкото черво след хранене. Извършените ин витро проучвания бяха сравнени с наскоро публикувани данни за разграждането на същите лекарства в човешки чревни течности [1].

Целта на настоящето изследване е да бъде определена скоростта на разграждане на лекарствата в изкуствена чревна среда след хранене и да се провери съответствието на получените данни с тези от човешките чревни течности.

Разграждането на изучаваните лекарства от екстракт от панкреатин и изолат от естераза беше описано добре като реакция от първи порядък, което позволи определянето на скоростна константа и полуживот. Изключение беше наблюдавано само при CC, при който реакцията протича по-бързо в сравнение с реакция от първи порядък. Данните получени от изолата от естераза обхващат добре интер-индивидуалната вариация в скоростта на лекарственото разграждане в човешки чревни течности, за разлика от резултатите получени с екстракт от панкреатин. Получените резултати показват, че изолата от естераза може да се използва за оценка за стабилността на лекарства в чревна среда след хранене.

Цитати: [1] Z. Vinarov, C. Tistaert, J. Bevernage, H. Bohets, P. Augustijns. Enzymatic Prodrug Degradation in The Fasted and Fed Small Intestine: In vitro Studies and Interindividual Variability in Human Aspirates., Int. J. Pharm. 649 (2024). doi: 10.1016/j.ijpharm.2023.123654

Благодарности: Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на проект № КП-06-ДВ-3 от 15.12.2021 г. (3D-GUT) към Фонд „Научни изследвания“, Министерството на образованието и науката, Национална програма за научни изследвания "ВИХРЕН-2021".

СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ НА ХИДРОФОБНИ БИОАКТИВНИ КОМПОНЕНТИ ОТ ЕКСТРАКТ ОТ *HYPERICUM PERFORATUM* L. В УСЛОВИЯТА НА СИМУЛИРАНА СТОМАШНО-ЧРЕВНА СРЕДА

Теодор Боянов¹, Владимир Петков¹, Антоанета Трендафилова², Захари Винаров¹, Славка Чолакова¹

¹ *Софийски университет “Св. Климент Охридски” Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, ул. Марин Русев 4, София 1164*

² *Институт по органична химия с център по фитохимия – БАН, ул. акад. Георги Бончев 9, София 1113*

Разтворимостта на хидрофобни активни вещества е един от двата основни фактора, определящи тяхната орална бионаличност. В чревните течности, хидрофобните вещества се солублилизират в колоидни агрегати съставени от жлъчни соли и други вещества. Целта на настоящото изследване е да бъде определена степента на солублизация на Нафтодиантронови и Флороглуцинолови производни от екстракт на *Hypericum perforatum* L. в симулирана стомашно-чревна среда. С помощта на течна хроматография е измерена солублизацията им в моделна чревна течност.

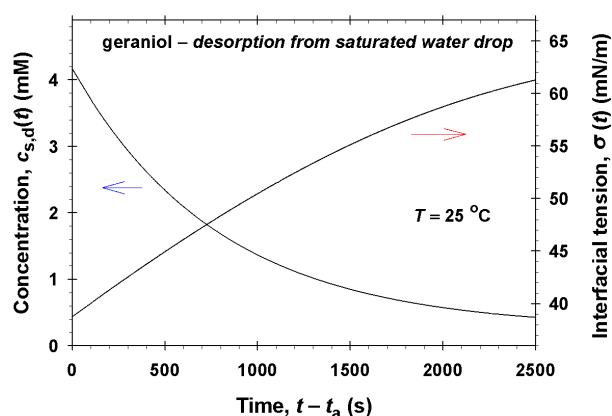
Установена е степента на солублизация на Флороглуцинолови и Нафтодиантронови производни, като е открита взаимовръзка между количеството солублилизирани вещества. Предполага се, че солублизацията на Флороглуцинолови производни се влияе от количеството на Нафтодиантронови производни. От друга страна при два от компоненти в сместа от Нафтодиантронови производни – Хиперицин и Псевдохиперицин се наблюдава конкурентна солублизация. Резултатите показват, че с увеличаване количеството Хиперицин, намалява това на Псевдохиперицин, което вероятно е свързано с улеснено солублизиране на Хиперицина от жлъчните соли.

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“.

АДСОРБЦИОННИ СВОЙСТВА НА ЛЕТЛИВИ АМФИФИЛИ НА ГРАНИЦАТА РАЗТВОР/ПАРИ

Ралица Узунова, Красимир Данов, Теодор Гърков, Румяна Станимирова

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 са широко използвани в парфюмните формулировки и козметиката, битовата химия и фармацията. Те имат частична растворимост във вода и относително ниски стойности на парното си налягане. Могат да се адсорбират на границата разтвор/пари, при което променят повърхностната реология. Целта на нашето

изследване е да се изучат адсорбционните свойства на две летливи амфифилни молекули - ментол и гераниол, които да се сравнят с вече публикуваните в литературата [1].

Определени са адсорбционните параметри на веществата, използвайки метода на максималното налягане в мехурче.

Изследвана е адсорбцията на летливите амфифили от техни пари към водна капка, използвайки метода на висящата капка. Изчислени са адсорбционните и десорбционните скоростни константи, използвайки вече определените параметри на веществата. Изследван е и процеса на изпарение на летливите молекули от наситената водна капка към въздуха.

По време на изпарението са изследвани реологичните свойства на адсорбционните слоеве, на част от амфифилите, използвайки метода на осцилиращата капка. Предложена е подходяща теоретична интерпретация на реологичните данни, въз основа на определените физикохимични параметри на изследваните молекули.

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

Благодарности: Тази научна работа е финансирана по проект КР-06-Н 79/4/2023, ФНИ–МОН.

ВЛИЯНИЕ НА ЗАРЯДА НА СИЛИЦИЕВА ПОДЛОЖКА ВЪРХУ АДСОРБЦИЯТА НА КАТИОННИ ПОВЪРХНОСТНО-АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА

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*

Веществата с антибактериални свойства са обект на нарастващ интерес през последните няколко десетилетия както заради тяхното активно приложение при епидемии, така и заради търсения баланс между антибактериалния ефект и прякото влияние върху безопасността за човешкото здраве. Катионните четвъртични амини имат доказан антибактериален ефект, и голям потенциал за разширяване на приложенията им предвид и тяхната повърхностна активност.

За изясняване на структурата на слоеве отложени върху силициева повърхност от разтвори на катионните повърхностно-активни вещества диоктил (2C8-DAC) и дидецил (2C10-DAC) диметиламониев хлорид, и дидецил метил полиоксиамониев пропионат (2C10-MEAP) поотделно и в смес с нейонен ПАВ Tergitol 15-s-7, проведохме системно елипсометрично изследване на структурата на отложените слоеве с промяна на рН. Сравнихме и омекрянето на слоевете при рН 2.5, 6 и 10. За изясняване на ролята на взаимодействията и на повърхностния заряд измерихме и ζ -потенциала на силициеви частици във вода и в разтвори на катионно ПАВ като функция от концентрацията. Анализът на получените резултати позволи да предложим прост модел за структурата на отложените слоеве, който да обяснява и особеностите в промяната на омекрянето на повърхности с такива слоеве.

Благодарности: Тази работа е частично подкрепена от ОП НОИР, съфинансирана от ЕС чрез ЕСИФ, проект BG05M2OP001-1.002-0023 - Център за компетентност "Интелигентни мехатронни, еко- и енергоспестяващи системи и технологии".

БИКОНТИНУАЛНИ МИЦЕЛАРНИ ФАЗИ: ФАЗОВО РАЗДЕЛЯНЕ И КАПАЦИТЕТ НА НАНОЕМУЛГИРАНЕ

Татяна Славова, Гергана Радулова, Красимир Данов

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

Редица въглеродороди могат да бъдат хомогенно диспергирани в биконтинуални мицеларни фази получени от водни разтвори на повърхностно активни вещества [1]. При разреждане такива дисперсии спонтанно образуват наноемулсии. В настоящата работа е изследвана възможността за образуване на мицеларна мрежа в случай на смеси с три анионни и две цвистерйонни повърхностно-активни вещества в присъствието на двувалентни и едновалентни соли.

Най-добри резултати са получени при използване на натриев лаурил етер сулфат с 1 етоксигрупа (SLES-1EO) и двете цвистерйонни повърхностно активни вещества – кокамидопропил бетаин (CAPB) или N,N-диметилдодециламин N-оксид (DDAO) в присъствието на малко количество от $MgCl_2$ или $CaCl_2$ [2]. Биконтинуални фази се образуват и в присъствието на висока концентрация на NaCl. Обемните свойства на тези фази са независими от концентрацията на първоначалните разтвори, от които те се отделят, като вискозитетите им са в тесен диапазон от 0.3 Pa.s до 0.8 Pa.s. И двете 8 wt% CAPB- и DDAO-съдържащи мицеларни мрежи поглъщат до 10 wt% лимонен и при разреждане спонтанно образуват наноемулсия с размер на капките 110–120 nm. Витамин Е може да бъде хомогенно диспергиран само във фаза с цвистерйонното CAPB и при разреждане тези дисперсии спонтанно образуват наноемулсии с размери на капките по-малки от 66 nm.

Цитати:

[1] M.T. Georgiev, L.A. Aleksova, P.A. Kralchevsky, K.D. Danov, Colloids Surfaces A 607 (2020) 125487;

doi: 10.1016/j.colsurfa.2020.125487

[2] T.G. Slavova, G.M. Radulova, K.D. Danov, Colloids and Interfaces 8 (2024) 11.

doi: 10.3390/colloids8010011

Благодарности: Това изследване е финансирано от проект КП-06-Н 79/4/2023 на ФНИ-МОН, България.

ОБРАЗУВАНЕ И ХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА ГЕЛ, ПОЛУЧЕН ОТ СМЕСИ НА MES И CAPB

Маноела Алексиева, Гергана Радулова, 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

Сравнение на реологичното поведение на смеси на метил естер сулфати (MES) и кокоамидопропил бетаин (CAPB) в присъствие или отсъствие на добавки (мастни алкохоли, коко моно етанол амид и соли) [1], показва че MES може да се използва за получаване на козметични продукти и продукти за дома с предварително дефинирани вискоеластични свойства.

Настоящото изследване е фокусирано върху ефекта от състава на MES (различни съотношения на MES с 16 или 18 въглеродни атома в опашката) в концентрирани водни разтвори с CAPB върху образуването на вискоеластични гелове. Приложени са реологични методи за характеризиране на еластичността, вискозитета при ниски скорости на деформация, привидния вискозитет, модулите на съхранение и загуба, тиксотропията и времето на релаксация на концентрираните мицеларни разтвори. Количествено са изяснени ефектите от температурата на MES и CAPB, добавените соли, твърдостта на водата и температурата. Установено е, че много бавното удължаване на такива капки гел и времето, необходимо за откъсване на капката, отлично корелира с измерената еластичност на разтворите. Проведените експерименти, предназначени да изследват скоростта на измиване на вискоеластичните смеси на MES и CAPB, ни помогнаха да класифицираме формулировките по отношение на тяхната изплакваща способност.

Това проучване разширява възможната практическа приложимост на концентрирани мицеларни разтвори на MES, които имат отлична стабилност спрямо твърдостта на водата, биоразградимост и биосъвместимост.

Източници:

[1] V.I. Yavrukova, G.M. Radulova, K.D. Danov, P.A. Kralchevsky, H. Xu, Y.W. Ung, J.T. Petkov, *Adv. Colloid Interface Sci.*, **2020**, 275, 102062; doi: 10.1016/j.cis.2019.102062

Благодарности: Тази работа е частично подкрепена от ОП НОИР, съфинансирана от ЕС чрез ЕСИФ, проект BG05M2OP001-1.002-0023 - Център за компетентност "Интелигентни мехатронни, еко- и енергоспестяващи системи и технологии".

ФАЗОВО ПОВЕДЕНИЕ НА НАТРИЕВ ЛАУРОИЛ ЛАКТИЛАТ ВЪВ ВОДА И В ОРГАНИЧНИ РАЗТВОРИТЕЛИ

Александра Тодорова, Диана Чолакова, Славка Чолакова

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

Повърхностно-активните вещества, ПАВ, са амфифилни молекули, съставени от хидрофилна глава и хидрофобна въглеродородна опашка. Те могат да се адсорбират на междупазовата граница и да намаляват нейната повърхностната енергия. Изследването на свойствата на биоразградимите ПАВ, сред които е натриевият лауроил лактилат (SLL), е от особен интерес, поради потенциала им да заместят синтетичните такива, които замърсяват околната среда [1]. Лактилатите са клас ПАВ с широка употреба като емулгатори [2] и пенни стабилизатори [3] в хранителната индустрия. Те се използват и като диспергиращи агенти в композити за съхранение на енергия [4].

Цел на настоящото изследване е да се охарактеризира фазовото поведение на анионния SLL във вода и в органични разтворители с различна полярност, включително алкохоли (пропиленгликол, етиленгликол) и масла (минерално, слънчогледово, циклохексан). Използваните експериментални методи включват оптична микроскопия, реологични измервания, (SAXS/WAXS) рентгено-структурен анализ и диференциална сканираща калориметрия.

Получените експериментални резултати показаха, че в силно полярен разтворител като водата ($\epsilon \approx 80$) SLL образува мултиламеларни везикули при концентрации ≥ 1 wt.%. Те се опаковат плътно и при повишаване на C_{SLL} до 15 wt.% осигуряват вискоеластичност на пробата. Във всички изследвани алкохоли, над определена концентрация SLL образува ламеларни фази. При по-нататъшно увеличаване на съдържанието му, въглеродородните опашки губят подвижността си и се подреждат в кристална фаза. В масла, чиято полярност е ниска ($\epsilon \approx 3$), SLL се отделя про формата на капки поради високата енергия на границата глава-разтворител и кристализира след престой при концентрации от 1 wt.%. Най-висока мономерна разтворимост (≈ 30 wt.%) се наблюдава в среда от монопропиленгликол с междинна полярност, $\epsilon \approx 32$.

Това изследване е финансирано от Европейския съюз - NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект № BG-RRP-2.004-0008-C01

- [1] P. Johnson, V.J. Pinfield, V. Starov, et al., *Adv. Colloid Interface Sci.*, 228 (2021) 102340
- [2] M.H. Azizi, G.V. Rao, *Food Chemistry*, 89 (2005) 133-138
- [3] J.-B. Bezelgues, S. Serieye, L. Crosset-Perrotin, M.E. Leser, *Colloids Surf. A.*, 331 (2008) 56-62
- [4] M. Nourani, N. Hamdami, J. Keramat, M. Shahedi, *Renewable Energy*, 88 (2016) 474-48

ВЛИЯНИЕ НА ТИПА АНИОННО ПОВЪРХНОСТНО-АКТИВНО ВЕЩЕСТВО ВЪРХУ НЕГОВИТЕ ПОВЪРХНОСТНИ И ПЕНООБРАЗУВАЩИ СВОЙСТВА

Мира Алипиева, 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: mal@lcpe.uni-sofia.bg*

Повърхностно-активните вещества (ПАВ) намират широко приложение в производството на миещи препарати, шампоани, душ-гелове, балсами за коса и други. В наши дни се търсят биоразградими алтернативи на конвенционалните повърхностно-активни вещества, за да се намали натрупването им в околната среда и неблагоприятните ефекти върху живите организми. Пенообразуващите и повърхностните свойства на разтворите зависят от природата и структурата на повърхностно-активното вещество. При нейонните ПАВ определящи са стеричните сили на отблъскване, поради което е необходимо достигане на почти плътен адсорбционен слой, за да се осигури стабилизиране на новообразуваната повърхност [1-2]. От друга страна при йонните ПАВ поради наличието на електростатично отблъскване е възможно добро пенообразуване още при 30 % повърхностно покритие [1].

Целта на настоящото изследване е да се определи ефектът от типа анионно повърхностно-активно вещество върху повърхностните и пенообразуващите свойства на разтворите, получени от него. Изследвани са три биоразградими ПАВ: натриев лаурил изетионат, натриев лаурил глицинат и натриев метил лаурил таурат, чието поведение в динамични и статични условия е сравнено с това на три конвенционални такива (натриев лаурил сулфат, натриев лаурил етер сулфат и натриев лаурил бензен сулфонат), които се използват широко в различни индустрии.

Установено е, че пенливостта на биоразградимите ПАВ може да бъде описана със същия подход, с който се описва пенливостта на конвенционалните сърфактанти [1]. Изследваните вещества стабилизират пени при достигане на повърхностни покрития сравними с тези на конвенционалните анионни ПАВ, което ги прави подходяща алтернатива за редица приложения.

Това изследване е финансирано от Европейския съюз - NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект № BG-RRP-2.004-0008-C01

[1] B. Petkova et al. *Advances in Colloid and Interface Science* 276 (2020) 102084

[2] L. Delforce et al. *Colloids Surf. A* 611 (2024) 133844.

РОЛЯ НА ВТОРИ СЪРФАКТАНТ ВЪРХУ РЕОЛОГИЧНОТО ПОВЕДЕНИЕ НА НАТРИЕВ ДОДЕЦИЛ ЕТЕР СУЛФАТ В ПРИСЪСТВИЕТО НА СОЛ

Стефани Паскова, Златина Митринова, Славка Чолакова

*Катедра по Инженерна химия и фармацевтично инженерство,
Факултет по химия и фармация, 1164 София, sp@lcpe.uni-sofia.bg*

Мицелите се получават в следствие на амфифилната природа на повърхностно-активните вещества като тяхната форма (сферична, елипсовидна, нишковидна или друга) зависи от параметъра на опаковане. Един от начините за повлияване на параметъра на опаковане е добавянето на сол, което води до първоначално нарастване на вискозитета, последвано от понижение. Такава крива се нарича „солева крива“ като позицията на максимума и големината на вискозитета зависят от типа на изследвания противойон [1]. Вискозитетът в максимума на солевата крива е много по-нисък за разтворите на анионния натриев додецил етер сулфат (SLES) в сравнение с максимума за сместа на SLES и цвистерйонното кокоамидопропил бетаин (CAPB), което е обяснено с по-трудното образуване на разклонени мицели за сместа [1,2].

Смесите от повърхностно-активни вещества често се използват в бита и козметиката като реологичното им поведение е от значение при използването на крайните продукти. В настоящата работа е изследван ефектът от добавянето на второ повърхностно-активно вещество върху реологичното поведение на SLES в присъствието на сол. Разгледани са анионните – натриев линеен алкилбензен сулфонат (LAS), първичен алкил сулфат (PAS) или нейонното – хепта (етиленгликол) монододецил етер (NI). Определено е влиянието на втория компонент върху солевите криви и концентрацията на сол, водеща до фазово разделяне за изследваните системи. Показано е, че при използване на PAS солевите криви се повлияват в най-малка степен поради сходната структура на молекулите на двете ПАВ. От друга страна добавянето на LAS или NI води до съществен ефект поради образуването на везикули или капки при фазово разделяне, респективно.

Това изследване е частично финансирано от Европейския съюз - NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект № BG-RRP-2.004-0008-C01

Цитати:

1. Z. Mitrinova H. Alexandrov, N. Denkov, S. Tcholakova, Effect of counter-ion on rheological properties of mixed surfactant solutions, *Colloids Surf. A* 643 (2022) 128746.
2. M. Pleines, W. Kunz, T. Zemb, D. Benczedi, W. Fieber, Molecular factors governing the viscosity peak of giant micelles in the presence of salt and fragrances, *J. Colloid Interface Sci.* 537 (2019) 682–693.

ЕФЕКТ НА СОЛИ ВЪРХУ РАЗТВОРИМОСТТА НА КОНВЕНЦИОНАЛНИ И БИО ПОВЪРХНОСТНО-АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА

Вяра Йорданова, Кристина Русанова, Христина Блецова,
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*

Повърхностно-активните вещества (ПАВ) се използват широко във фармацията, козметиката и хранително-вкусовата промишленост, както и в продуктите за лична хигиена и почистване на дома. Във водни разтвори, при ниски концентрации молекулите на ПАВ са под формата на мономерни, докато при концентрации над критичната концентрация на мицелообразуване (СМС) те се групират в мицеларни агрегати. Фазовото поведение на редица йонни ПАВ в присъствие на електролити е описано в литературата като е показано, че границата на разтворимост се влияе както от температурата, така и от присъствието на страничен електролит [1,2]. Същевременно най-често използваните анионни ПАВ водят до замърсяване на околната среда и са сравнително агресивни спрямо кожата. Затова се наблюдава тенденции за тяхната замяна с по-щадящи и биоразградими алтернативни съфактанти.

Целта на настоящето изследване е да се определи фазовото поведение на биосъфактанта натриев лауроил саркозинат в присъствие на соли и да се сравни с това на конвенционален ПАВ - натриев додецил бензен сулфонат (LAS). Разгледани са ефектите на температурата, рН и типа противойон.

Получените експериментални резултати за фазовата поведение на LAS са в добро съгласие с резултатите известни от литературата [1,2]. Показано е, че производението на разтворимост на калциевия лауроил саркозинат, който се образува при добавяне на калциеви йони към разтворите на натриев лауроил саркозинат при концентрации под СМС е около 10-пъти по-високо от това за калциевия бензен сулфонат, което позволява използването на натриев лауроил саркозинат до по-високи концентрации на калциевите йони в разтвора. При концентрации над СМС, обаче, толерантността на натриевия саркозинат към добавянето на калциеви йони е много по-ниска в сравнение с толерантността на LAS, което е обяснено с по-малката способност на мицелите на натриевия саркозинат да свързват към своята повърхност калциевите йони.

Това изследване е финансирано от Европейския съюз - NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект № BG-RRP-2.004-0008-C01

Цитати:

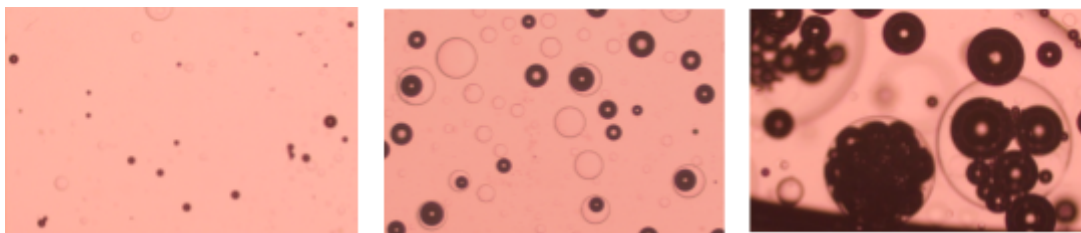
1. Noïk et al., *Journal of Colloid and Interface Science*, 1987, 115(1), 36
2. Maneedaeng et al., *J Surfact Deterg*, 2012, 15, 523–531

ЗАРОДИШООБРАЗУВАНЕ НА МЕХУРЧЕТА В ПРЕСИТЕНИ ЕМУЛСИОННИ КАПКИ

Георги Георгиев¹, Иван Лесов¹, Славка Чолакова¹

¹ *Катедра по Инженерна химия и фармацевтично инженерство,
Софийски университет „Св. Климент Охридски“, gi@lcp.uni-sofia.bg*

Образуването на мехурчета в преситени с газ дисперсии е интересен научен проблем, който има и практическо приложение, тъй като зародишообразуването е важен процес в хранително-вкусовата промишленост и в козметиката. Процесът на зародишообразуване е широко изследван в хомогенни разтвори и в суспензии на твърди частици, но е доста по-слабо изследван за хетерофазни течни системи (емулсии). Целта на настоящото изследване е да изясни влиянието на физикохимичните и хидродинамичните условия върху процеса на зародишообразуване в емулсионни капки. За целта първо преситихме дисперсната фаза с въздух, след което я емулгирахме в непрекъснатата среда, за да получим преситени с газ емулсионни капки. Изследвахме процеса на образуване на мехурчетата в емулсионните капки чрез наблюдения с оптичен микроскоп в зависимост от (а) разтворимостта на газа в дисперсната и непрекъснатата фази; (б) нивото на пресищане с газ, в зависимост от налягането и отношението на разтворимостта в двете фази; (в) вискозитетите на непрекъснатата и дисперсната фаза; (г) повърхностните свойства и (д) хидродинамичните условия. Установихме, че зародишообразуването минава през максимум като функция от налягането на насищане, вискозитета на дисперсната фаза и скоростта на разбъркване. Зародишообразуването е по-изразено в емулсии, където преходът на газа от дисперсната фаза към непрекъснатата среда е затруднен както поради термодинамични (отношение на разтворимостите на въздуха в двете течни среди), или кинетични фактори (напр. плътни адсорбционни слоеве на повърхността на капките).



Фигура 1. Илюстрация на мехурчета, получени чрез зародишообразуване в преситени емулсионни капки при различни експериментални условия.

МОЛЕКУЛНО-ДИНАМИЧНИ СИМУЛАЦИИ НА СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ НА ЛЕКАРСТВЕНИ ВЕЩЕСТВА В СМЕСЕНИ МИЦЕЛИ ОТ ЖЛЪЧНИ СОЛИ И ФОСФОЛИПИДИ

Никола Генчев¹, Фатмегюл Мустан¹, Лилия Винарова¹, Jan Bevernage³, Christophe Tistaert³, Анела Иванова², Славка Чолакова¹, Захари Винаров¹

¹*Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство*

²*Катедра по Физикохимия Факултет по химия и фармация,
СУ “Св. Климент Охридски”*

³*Janssen Pharmaceutica NV, Beerse, Belgium
ng@lcpe.uni-sofia.bg*

При оралната адсорбция на лекарства изключително важна роля играе солюбилизацията им в смесените мицели на жлъчни киселини и фосфолипиди, които се образуват в дванадесетопръстника и в тънките черва в стомашно-чревния тракт. Целта на настоящето изследване е да определим местоположението, ориентацията и взаимодействията на различни лекарствени молекули с моделни смесени мицели и да изясним ролята на химичната структура на лекарството върху тези взаимодействия.

За целта използваме атомистични молекулно-динамични симулации, чрез които изследваме солюбилизацията на различни лекарствени молекули в смесени мицели на таурохолат (ТС) и диолеилфосфатидилхолин (DOPC). Изследвани са 6 лекарствени молекули с различна водна разтворимост и липофилност в система от спонтанно образувана смесена мицела от ТС и DOPC при 145 mM NaCl и температура 37 °C. Генерирани са 3 независими траектории по 300 нс, а анализите са извършени за последните 100 нс и получените резултати за солюбилизацията, локацията и броя водородни връзки са усреднени за трите траектории на всяка система.

Получена е много добра корелация между изчислената и експериментално измерената солюбилизация на изследваните лекарствени молекули, за които е определена и най-предпочетените място и ориентация в мицелата, която зависи от способността на молекулите да образуват водородни връзки с водата. Установено, е че броят на хидроксилните групи в лекарствената молекула значително влияе върху солюбилизацията, ориентацията и локацията на молекулата в мицелата.

Използваният изчислителен подход е мощен инструмент, който може да се използва за първоначална оценка на солюбилизацията на новооткрити лекарства в смесени мицели на жлъчни киселини и фосфолипиди.

Благодарности:

PRACE ICEI, project ALKOOL - icp015 for computational time on HPC Piz-Daint, CSCS, Zurich. National Research Program “VIHREN-2021”, project 3D-GUT (№ KP-06-DV647 3/15.12.2021) and Johnson & Johnson Innovative Medicine.

СЕКЦИЯ НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Магдалина Попова, ФХФ - СУ

Кристина Тамахярова, ХФ - ПУ

Павел Николов, ФХФ - СУ

Антоний Сурчев, ФХФ - СУ

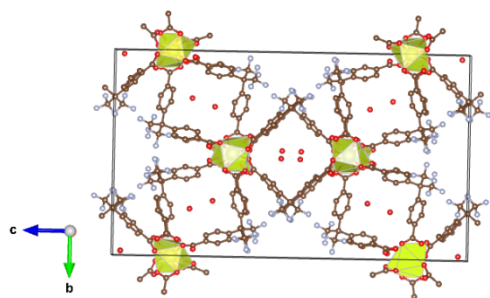
ЛАНТАНОИДНИ МЕТАЛ-ОРГАНИЧНИ РАМКИ С V-ОБРАЗЕН ЛИНКЪР ЗА СЕНЗОРИ ВЪВ ВОДИ

Магдалина Попова¹, Мартин Цветков¹, Деница Еленкова¹

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Неорганична Химия, 1164 София, бул. "Джеймс Баучер" №1, e-mail: magi_192001@abv.bg

Метал-органичните рамки (MOFs) са изградени от органични многофункционални линкъри и неорганични изграждащи единици, които могат да са метални йони или метални оксидни клъстери[1]. Последните 20 години се изследват усилено заради разнообразните си приложения. Когато са изградени с помощта на лантаноидни елементи възможностите за приложения се разширяват още повече. Това се дължи на високите координационни числа на тези метали, което води до голямо разнообразие на получените структури[2]. Способността на някои от йоните на лантаноидните елементи да емитират във видимата част на спектъра позволява материали на базата на тях да се прилагат като сензори за различни замърсители във вода[3].

В настоящото изследване комбинираме уникалните свойства на йоните на два лантаноидни елемента, Tb и Eu, да луминесцират и V-образната структура на линкъра 4,4'-(1,1,1,3,3,3-хексафлуоропропан-2,2-диил)добензоена киселина (H₂FPB). Установена е структурата на получените Tb-FPB и Eu-FPB (фиг.1). Обстойно са изследвани стабилността и поведението на пробите в присъствието на различни органични молекули, катиони, аниони, както и антибиотици.



Фиг.1. Структура на получените Tb-FPB и Eu-FPB.

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

Цитати:

1. S. R. Batten, N. R. Champness, X.-M. Chen, J. Garcia-Martinez, S. Kitagawa, L. Öhrström, M. O’Keeffe, M. Paik Suh, J. Reedijk, *Pure Appl. Chem.* 2013, vol. 85, 1715–1724.
2. F. Gándara, A. de Andrés, B. Gómez-Lor, E. Gutiérrez-Puebla, M. Iglesias, M. A. Monge, D. M. Proserpio, N. Snejko, *Cryst. Growth Des.* 2008, vol. 8, 378–380.
3. Y. Chen, S. Ma, *Rev. Inorg. Chem.* 2012, vol. 32, 81–100.

ПОЛУЧАВЕ НА НОВИ КОМПЛЕКСИ НА Cu(II), Ni(II), Co(II) С (2-(МЕТИЛКАРБАМОИЛ)ФЕНИЛ)КАРБАМАТ

Кристина Тамахкярова, Петя Маринова¹, Никола Бурджиев², Миглена Милушева³,
Таня Атанасова³, Слава Цонева⁴, Евелина Върбанова⁴, Росица Михайлова⁵,
Емилия Чернева⁶, Юлиан Тумбарски⁷

¹ПУ “Паисий Хилендарски“, Химически факултет, Катедра Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия, ул. “Цар Асен“ 24, 4000 Пловдив,
E-mail: marinova@uni-plovdiv.bg; stu2205571029@uni-plovdiv.bg

²СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра Органична химия и фармакогнозия, бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164, София,
E-mail: nburdzhiev@chem.uni-sofia.bg

³ПУ “Паисий Хилендарски“, Химически факултет, Катедра Органична химия, ул. “Цар Асен“ 24, 4000 Пловдив, E-mail: tanya@uni-plovdiv.bg

⁴ПУ “Паисий Хилендарски“, Химически факултет, Катедра Аналитична химия и компютърна химия, ул. “Цар Асен“ 24, 4000 Пловдив,
E-mail: slava.tsoneva@uni-plovdiv.bg

⁵Медицински университет-София, Катедра Фармакология, Фармакотерапия и Токсикология, Факултет по фармация, 1431 София;
E-mail: rositsa.a.mihaylova@gmail.com

⁶Медицински университет-София, Катедра Химия, Факултет по фармация, 1431 София; E-mail: e.d.cherneva@gmail.com

⁷Катедра микробиология, Технологичен факултет, УХТ-Пловдив, 4002, Пловдив,
E-mail: tumbarski@abv.bg

Получени са нови комплексни съединения на Cu(II) Ni(II), Co(II) с (2-(метилкарбамоил)фенил)карбамат. Проучени са условията за синтез на комплексните съединения като са варирани различни разтворители и рН. Установено е, че комплекс се получава при смесване на воден разтвор на съответната метална сол (CuCl_2 , $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Co}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) с разтвор на (2-(метилкарбамоил)фенил)карбамат в DMSO. Синтезите са провеждани в алкална среда, като молното отношение на комплексообразуване е $\text{M:L:OH}^- = 1:2:2$. Новополучените съединения са охарактеризирани с Тт, ИЧ, МР-AES за Ni(II) и Co(II), и ^1H -, ^{13}C -ЯМР спектроскопия.

Въз основа на получените експериментални данни се дискутира вероятната структура на комплексите. Изследвани са антибактериалната и цитотоксична активности на всички вещества.

Благодарност: Това изследване е проведено с финансовата подкрепа на Фонд Научни изследвания към ПУ „П. Хилендарски“, договор СП 23-ХФ-006.

МЕХАНОХИМИЧНО АСИСТИРАН ТВЪРДОФАЗЕН СИНТЕЗ, ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ И ОПТИЧНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ НА $Y_{2-x}Tb_xHf_2O_7$

Павел Николов, Мартин Цветков

*Лаборатория по химия на редкоземните елементи, Факултет по химия и фармация,
Софийски университет „Свети Климент Охридски“,
pavelnikolov3103@gmail.com*

Известно е, че смесенометалните оксиди на редкоземните елементи с пироклорна структура са подходящи луминесцентни матрици като това се дължи на тяхната химическа стабилност, нетоксичност и лесен контрол на оптичните им свойства чрез заменяне на един редкоземен йон с друг¹. Такъв смесенометален оксид е $Y_2Hf_2O_7$, който е доказано добра матрица за Eu(III). Стандартния метод за синтез обаче изисква нагряване при температура над 1500°C в продължение на дни.

В настоящето изследване за първи път е разгледан механохимично асистиран синтез на $Y_2Hf_2O_7$ модифициран с Tb(III) от съответните оксиди. Представената процедура съкращава значително времето за наляване на пробите при висока температура като е постигнато пълно превръщане на началните оксиди в желан материал за по-малко от 24 часа. Всички получени материали са охарактеризирани чрез набор от физикохимични методи (XRD, UV-VIS, флуоресцентна спектроскопия). За първи път детайлно е решена кристалната структура на твърди разтвори от типа $Y_{2-x}Tb_xHf_2O_7$ чрез прилагане на метод на Ритвелд. Установен е ефекта върху коефициента на деформация върху елементарната клетка по-големия Tb(III). Чрез метод на Williamson-Hall са определени микроструктурните характеристики като е оценено тяхното влияние върху оптичните свойства на получените материали.

Получените резултати показват значението на механохимичната активация върху успешното получаване на материали с пироклорна структура преди наляване при висока температура.

1. S. Gupta & Y. Mao, *Materials Letters*, 303, 2021, 130560

СТРУКТУРА И ОПТИЧНИ СВОЙСТВА НА НОВ ВИД ФЛУОРЕСЦЕНТНИ ПИРОГЕРМАНАТИ

Антоний Сурчев, Мартин Цветков

Лаборатория по химия на рядкоземните елементи, Софийски университет “Св. Климонт Охридски”, Факултет по химия и фармация, София 1164, as31878@gmail.com

Вещества с пироклорна структура от типа $A_2B_2O_7$ представляват голям интерес още от 60-те години на 20-ти век поради своите физични и химични свойства. Пирогерматите на рядкоземните като представители на смесенометалните оксиди с пироклорна структура са подходящи луминесцентни матрици, чиито свойства и кристална структура лесно могат да бъдат контролирани чрез замяна на един рядкоземен елемент с друг.

Настоящото изследване представя систематично изследване два типа твърди разтвори от семейството на пирогерманатите, а именно $Gd_2Ge_2O_7 - Eu_2Ge_2O_7$ и $Y_2Ge_2O_7 - Tb_2Ge_2O_7$. Получените материали са детайлно охарактеризирани чрез набор от физикохимични методи – XRD, TEM, FT-IR, UV-VS и флуоресцентна спектроскопия. Изследванията показват, че гадолиниевият пирогерманат е подходяща матрица за Eu(III), докато итриевият аналог за Tb(III).

СЕКЦИЯ ФИТОХИМИЯ И ФАРМАКОГНОЗИЯ

Данаил Павлов, МУ – Варна

Димана Добрева, ХТМУ

Траян Груйкин, ФХФ – СУ

**АНТИТУМОРНО, ПРОТИВОВЪЗПАЛИТЕЛНО И
ГASTPO-ЕНТЕРО-ХЕПАТОПРОТЕКТИВНО ДЕЙСТВИЕ НА
БИОФЛАВОНОИДА ФУСИН, ИЗОЛИРАН ОТ ДЪРВЕСИНА НА
СМРАДЛИКА (*COTINUS COGGYGRIA* SCOP.)**

Данаил Павлов¹, Мирослав Новакович², Веле Тешевич³, Миглена Николова¹, Златина Господинова⁴, Георги Анто^{4,5}, Наталия Кръстева⁵, Мирослав Ефтимов⁶, Антоанета Георгиева⁶, Надежда Стефанова⁷, Мария Цанева⁷, Милена Тодорова⁶, Мехмед Рейзов⁶, Стефка Вълчева-Кузманова⁶

¹Медицински университет „Проф. д-р Параскев Стоянов“ – Варна, Катедра по биохимия, молекулна медицина и нутригеномика, бул. “Цар Освободител” 84б, 9000 Варна, danailpavlov@gmail.com; ²Белградски университет, Институт по химия, технология и металургия, Studentski trg 12-16, 11158 Beograd, Srbija, mironov76@yahoo.com; ³Белградски университет, Катедра по органична химия, Studentski trg 12-16, 11158 Beograd, Srbija, vtesevic@chem.bg.ac.rs; ⁴Българска академия на науките, Институт по физиология на растенията и генетика, ул. “Акад. Георги Бончев”, бл. 21, 1113 София, zlatina.go@abv.bg; ⁵Българска академия на науките, Институт по биофизика и биомедицинско инженерство, ул. “Акад. Георги Бончев”, бл. 21, 1113 София, antov8107@abv.bg; ⁶Медицински университет „Проф. д-р Параскев Стоянов“ – Варна, Катедра по фармакология и клинична фармакология и терапия, ул. “Марин Дринов” 55, 9000 Варна, stefkavk@yahoo.com; ⁷Медицински университет „Проф. д-р Параскев Стоянов“ – Варна, Катедра по обща и клинична патология, съдебна медицина и деонтология, бул. “Христо Смирненски” 1, 9000 Варна, Nadezhda_stefanova@yahoo.com

Популярното лечебно растение смрадлика (*Cotinus coggygia*) има високо съдържание на полифеноли, от които дихидрофлавонолът фустин е почти непроучен. Цел на настоящото проучване е да се изследва фармакологичната активност на фустин в експериментални модели с човешки туморни клетъчни линии и опитни животни. Получени и обсъдени са конкретни резултати по следните задачи: (1) Изолране и пречистване на фустин от дървесина на смрадлика чрез обратнофазова високоефективна течна хроматография и ЯМР-спектроскопия; (2) Оценка на *in vitro* цитотоксичния и цитостатичния потенциал на фустина върху панел от 5 човешки ракови клетъчни линии, ведно със способността му да модулира молекулните механизми на апоптоза, процесите на миграция и адхезия, и да блокира клетъчния цикъл; (3) Оценка на *in vivo* противовъзпалителното и органопротективно действие на фустин при плъхове в модели на: карагенан-индуцирано остро възпаление на лапата, индометацин-индуцирана стомашна улцерогенеза, тринитробензен сулфонат-индуциран колит и парацетамол-индуцирана хепатотоксичност чрез биохимични анализи на кръвен серум и органни хомогенати, хистопатологична оценка и имунохистохимични тестове.

Изследването е финансирано от Фонд „Научни изследвания“, договор № КП-06-Н43/6/2020.

ОТ ПРИРОДАТА КЪМ ЛАБОРАТОРИЯТА: ИЗСЛЕДВАНЕ НА ЛЕКАРСТВЕНИТЕ РАСТЕНИЯ

Димана Добрева¹

¹ *Химикотехнологичен и металургичен университет, 1408,
petrovadimana888@gmail.com*

Докладът представя значението на лекарствените растения в медицината, фармацевтиката и козметиката, подчертавайки тяхната историческа важност и съвременното им приложение. Изследванията в областта на фармакогнозията откриват нови перспективи за използването на биоактивни съставки за лечение на различни заболявания като рак, ХИВ/СПИН и малария. Вторичните метаболити, като фенолните съединения и флавоноидите, са от особено значение за фармацевтичната индустрия, тъй като допринасят за адаптацията на растенията към околната среда и предлагат потенциал за откриване на нови лекарства.

В допълнение, лекарствените растения играят ключова роля в козметичната индустрия, където съставки като розмарин, лайка и алое вера се използват за създаване на продукти за грижа за кожата и косата. Фитокосметиката развива иновативни подходи, включително използването на нанотехнологии и биотехнологични методи за екстракция на активни съставки, което допринася за по-ефективни и устойчиви козметични продукти.

Освен това, билковата медицина продължава да бъде популярна и представлява важен източник за разработване на нови медикаменти. Разглежда се широкият спектър на лекарствените растения и тяхната важност в различни индустрии, като продължават инвестициите в изследванията за развитие на пълния им потенциал за благото на човечеството.

Цитати:

Historical review of medicinal plants' usage by Biljana Bauer Petrovska

Pharmacognosy in modern pharmacy curricula by Satyajit D. Sarker

Trends in Food Science & Technology, Volume 50, April 2016, Pages 144-158

Rasool Hassan BA (2012) Medicinal Plants (Importance and Uses), Pharmaceut Anal Acta

International Journal of Herbal Medicine 2016; 4(4): 59-64

ИЗПОЛЗВАНЕ НА TEACHABLE MACHINE ЗА АВТОМАТИЗИРАНО ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА МИКРОСКОПСКИ ПРЕПАРАТИ ОТ РАСТИТЕЛЕН МАТЕРИАЛ (FOLIUM)

Траян Груйкин¹, Мирослав Бояджиев¹, Венцислав Поповски¹, Асен Стоянов¹

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

Микроскопският анализ е метод във фармакогнозията използван за идентифициране на растителни вещества, основаващ се на разпознаването на характерни диагностични фрагменти, достъпен и изискващ специфични експертни умения. Машинното обучение е съвременен подход използван и за определяне на идентичност. Наличните разработки основно поставят фокус върху разпознаването на растения в природни условия [1]. В настоящото изследване разглеждаме ефективността на Teachable Machine (уеб-базиран Google инструмент за създаване на модели за машинно обучение)[2], в автоматизирането на идентификацията на микроскопски препарати от *Uvae ursi folium*, *Vitis idaeae folium* и *Buxi folium*. Изследването е проведено в лабораторията по фармакогнозия на Факултета по химия и фармация, СУ “Св. Климент Охридски”. Използван е растителен материал от учебната сбирка (колекция 2022-2023 - Северен Пирин). Микроскопските препарати са приготвени по фармакопейна методика (2.8.23) с 80% воден разтвор на хлоралхидрат (Honeywell). За анализ и заснемане на фотоматериалите са използвани светлинен микроскоп Zeiss Primostar iLED и Zeiss Labscope 4.2.1. Обучаването на моделите е извършено, чрез съставен набор от 200 фотоматериала за всяко от растителните вещества. Моделите са сравнени по вътрешни параметри на Teachable Machine (Accuracy per class, Confusion matrix, Accuracy per epoch, Loss per epoch). Определени са фрагменти с най-голяма тежест при идентификация. Най-добрите модели са подложени на крос-валидиране с нови фотоматериали и успешно идентифицират епидермални фрагменти. Моделите могат да бъдат използвани като помощно средство при микроскопски анализ. Необходимо е допълнително разглеждане на способностите на модели обучени с по-голям набор фотоматериали, както и върху такива от различни морфологични групи растителни вещества.

Цитати:

1. Kavitha S., Kumar T.S, Naresh E. et al. Medicinal Plant Identification in Real-Time Using Deep Learning Model. *SN COMPUT. SCI.* 2024, 5:73
2. Teachable Machine (2024). Version 2.0. Published on the Internet; <https://teachablemachine.withgoogle.com/>, (Accessed 30th April 2024)

Авторите изразяват благодарност за финансова подкрепа по проект №80-10-142 / 17.4.2024 г.

XXII НАЦИОНАЛНА КОНФЕРЕНЦИЯ

ПО ХИМИЯ ЗА СТУДЕНТИ И ДОКТОРАНТИ

15-17 май 2024 г. София

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

