

XXIII НАЦИОНАЛНА КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИЯ ЗА СТУДЕНТИ И ДОКТОРАНТИ

14-16 май 2025 г. София



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

XXIII Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2025

Програма и резюмета

Софийски университет, Факултет по химия и фармация

бул. „Джеймс Баучер“ №1, София 1164

Web-страница на научната конференция:

<http://fcp-uni-sofia.eu/scc/>

XXIII Национална конференция по химия за студенти и докторанти се организира от:

Факултет по химия и фармация на
Софийския университет „Св. Климент Охридски“
Факултетен студентски съвет при ФХФ
Хумболтовия Съюз в България

Конференцията се организира с подкрепата на проект "SUMMIT" (Sofia University Marking Momentum For Innovation and Technological Transfer),
<https://summit.uni-sofia.bg/>

НАУЧЕН СЪВЕТ

проф. Анела Иванова, СУ
акад. 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

чл. кор. 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
докторант Стоян Граматиков, СУ
студент Поля Колева, СУ
студент Димитрина Йотова, СУ
студент Анастасия Язова, СУ

XXIII Национална конференция по химия за студенти и докторанти
Програма

14 май 2025, 130 аудитория на ФХФ, СУ

10:00 10:30 **Регистрация**, пред 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

10:30 11:30 **Откриване, 130 аудитория**, Факултет по химия и фармация на СУ

Лекция на акад. проф. дхн Вася Банкова,

Институт по органична химия с център по фитохимия – БАН

„Защо ни е фитохимията?“

Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Катализ“

12:30 12:50 Павел Николов, Й. Захариева, М. Цветков

„Охарактеризиране и каталитична активност на облъчен g-C₃N₄“

12:50 13:10 Димитър Гагашев, М. Цветков

„Фентън-подобна каталитична активност на CuO получен от соно-солвотермално синтезиран Si-MOF“

13:10 13:30 Владимир Григоров, С. Стефанова, М. Цветков

„Ефект на модификацията с Ni²⁺ на Gd₂CuO₄ върху каталитичното активиране на пероксимonosulfat“

13:30 13:50 Ивета Стаменова, Д. Гагашев, М. Цветков

„Синтез, охарактеризиране и каталитични свойства на биметални метал-органични рамки от типа MIL-100“

13:50 14:10 София Стефанова, Й. Захариева, М. Цветков

„Структурни, оптични и фотокаталитични свойства на твърди разтвори от типа Sr_{1-x}Eu_xTiO₃“

14:10 14:30 Кафе-пауза

Секция „Неорганична химия“

14:30 14:50 Димитър Бойчев, Б. Бурдин

„Иновативен подход за настройка на регулатора на емулаторен модул на акумулаторни батерии при процес на разреждане“

14:50 15:10 Виктор Янев, М. Недялков, Р. Стоянова

„Изследване на Pr₆O₁₁ като потенциален заместител на CeO₂ в литиево-йонни батерии“

15:10 15:30 Калина Мяшкова, Т. Спасов, С. Колев

„Полимерно инклузивни мембрани за твърдофазна екстракция на йони“

15:30 15:50 Иво Лозанов, Б. Митрев, К. Колев, Л. Лютов

„Синтез, физикохимични характеристики и термична стабилност на редуктора LiH₂PO₂“

15:50 16:10 Кафе-пауза

16:10 16:30 Емил Кочев, И. Георгиева, Д. Еленкова

„Изследване на фотоактивните свойства на индандионните производни и потенциала им за усилване луминесценцията на лантаноиди“

16:30 16:50 Антоний Сурчев, Й. Захариева, М. Цветков
„Структурни и оптични свойства на флуоресцентни пирогерманати от типа $Gd_{2-x}Sm_xGe_2O_7$ “

Секция „Методика на обучението по химия“

16:50 17:10 Елисавета Кожухарова
„Химията атрактивна в училище чрез STEAM и медийна грамотност“

17:10 17:30 Наско Стаменов, И. Лозанов
„UV-VIS спектрофотометрията в училище. Проблеми и решения“

15 май 2025, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Фитохимия и фармакогнозия“

9:30 9:50 Мирослав Бояджиев, Т. Груйкин, А. Стоянов
*„Оценка на количеството хидроксиканелени киселини и определяне на микроморфологични белези за балкански и чужди растителни видове от подсемействата на *Lamiaceae*“*

9:50 10:10 Сезан Ахмед, Д. Божилов, С. Манолов, И. Иванов
*„Изследване потенциала на дълбоко евтектични разтворители за екстракция на полифеноли от листата на смокиня (*Ficus carica*)“*

Секция „Органична химия“

10:10 10:30 Дона Саралиева, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова
„Получаване на кумаринфосфониеви соли и реакции с ароматни алдехиди“

10:30 10:50 Кафе-пауза

10:50 11:10 Бойко Василев, А. Василев
„Ацидохромни стирилхемицианинови багрила с (E)-3-алкил-2-(4-(4-фенилтиперазин-1-ил)-бензо[d]тиазол-3-ил) хромофор за визуализиране на свободна ДНК в кисела среда“

11:10 11:30 Никол Димова, Д. Димитрова, С. Манолов, Д. Божилов, И. Иванов
„Синтез на нови триметазидинови производни с профени“

11:30 11:50 Изабела Танева, М. Къндинска, Т. Недева, Т. Радойкова, С. Георгиева, Xi Wang, M. Wang
„Синтез и приложение на нови заместени бензимидазоли, бензилиденмалононитрили и пиразолини“

11:50 12:10 Мария Иванова, Р. Ляпчев
„Синтез на нови нафто[1,2]имидазоли, нафто[1,2]имидазолиеви соли и нафтоимидазолилиденнови паладиеви комплекси с потенциално приложение в паладийкатализирани реакции“

12:10 12:50 Обедна почивка

Секция „Полимери“

12:50 13:10 Савина Колева, Д. Николова, Е. Василева
„Хомо- и съполимери на сулфобетаин метакрилат и N,N'- диметилакриламид като нови системи за модифицирано освобождаване на рутин хидрат“

13:10 13:30 Явор Христов, Е. Димитров, С. Долева, Н. Тончева-Мончева, Х. Новаков, С. Рангелов
„Синтез на нови циклични полимерни "четки" от съполимери на 2-хидроксиетил метакрилат и метил метакрилат за потенциални биомедицински приложения“

13:30 13:50 Крум Александров, Е. Димитров, Н. Тончева-Мончева, П. Шестакова, С. Рангелов
„Синтез на полимерни амфифили за модификация на повърхността на ниозоми“

13:50 14:10 Анна Пранчева, К. Каменова, П. Петров

„Синтез и анализ на наноразмерни комплекси от катионни полимерни мицели и протеолитичен ензим сератиопептидаза, покрити с хиалуронова киселина“

14:10 14:30 Кафе-пауза

Секция „Биохимия“

14:30 14:50 Трифон Попов, С. Христова, А. Живков

„Енергия на асоциация на нормален и мутантен коагулационен фактор VIII с фактор IX и фактор на фон Вилебранд при хемофилия тип A“

14:50 15:10 Ива Райкова, Ана Атанасова, М. Янева, Й. Георгиев

„Значение на извънклетъчния матрикс при развитието на туморни заболявания“

Секция „Физикохимия“

15:10 15:30 Васил Иванов, В. Тончев

„Статика и динамика на формирането на групи от стъпала тип „Стоянов“ върху кристални повърхности“

15:30 15:50 Валентина Милева, С. Гайдарова, Г. Маджарова, Х. Цачев

„Получаване, охарактеризиране и молекулно моделиране на липидни лекарство-доставящи системи“

15:50 16:10 Кафе-пауза

Секция „Изчислителна химия“

16:10 16:30 Лора Велинова, Н. Кирчева, В. Николова, С. Ангелова, Т. Дудев

„Теоретично изследване на включването на канабидиол в бета-циклодекстрин“

16:30 16:50 Вероника Петкова, Х. Рашеев, А. Таджер, М. Doublet

„Структурно-електрохимичен анализ на твърд въглерод като аноден материал за натриево-йонни батерии“

16:50 17:10 Стоян Граматиков, П. Петков, Г. Вайсилов

„Молекулно-динамично изследване на структурна деформация на зеолит RHO във водна среда“

17:10 17:30 Поля Колева, И. Колева, Х. Александров

„Моделиране на комплекси на Rh катиони в зеолит тип BEA“

16 май 2025, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Химични и фармацевтични технологии“

9:30 9:50 Никол Стоева, Ж. Вълкова, Д. Чолакова

„Спонтанно образуване на несферични частици чрез фазово разделяне на липиди при замръзване“

9:50 10:10 Татяна Славова, К. Маринова, Р. Станимирова, К. Данов

„Ефикасност и механизми на отделяне на маслени замърсявания от изкуствена кожа“

10:10 10:30 Маноела Алексиева, Г. Радулова, К. Данов

„Оптимизиране на формулировка за шампоан, съдържаща метил естер сулфонати по отношение на вискозитет и мътност“

10:30 10:50 Кафе-пауза

10:50 11:10 Димитрина Фотева, С. Аначков, С. Чолакова

„Ефект на цинкови катиони върху биоцидните свойства на смеси от анионни и цвитерйонни повърхностно-активни вещества“

XXIII Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2025

11:10 11:30 Йордан Сыйков, Х. Мирчева, Н. Холмсток, С. Арора, Ян Бевернаж, К. Тистерт, З. Винаров
„Ефект на състава на изкуствените чревни течности върху разтварянето на аморфни твърди дисперсии“

11:30 11:50 Стилиян Колев, В. Петков, З. Винаров
„Влияние на полимери върху кристализацията на аморфен глибенкламид в чревна среда“

11:50 12:50 Обедна почивка

12:50 13:10 Христина Мирчева, М. Миткова, З. Винаров
„Гастроинтестинална физиология и фармакокинетични взаимодействия между храна и лекарства“

13:10 13:30 Росена Крушовалиева, Х. Цачев
„Липозомите: интелигентни системи за натоварване и освобождаване на терапевтични агенти“

13:30 13:50 Илиан Димитров, В. Рангелова, Т. Спасов
„Получаване и охарактеризиране на кокрисали на базата на нестероидни противовъзпалителни лекарства и органични киселини“

13:50 14:10 Daniel Argilashki, N. Toshev, Y. Uzunova, T. Dudev
„Synthesis, Characterization And DFT Study Of Chitosane-Fructose Derivative“

14:10 14:30 Кафе-пауза

Секция „Фармацевтична химия“

14:30 14:50 Валентин Петров, А. Пешева, А. Пъшев, Т. Александрова, Л. Петрова, К. Илиева, М. Атанасова, Г. Ставрева, Г. Алтънков, Д. Чешмеджиева
„Синтез, анализ и оценка на биологичната активност на нови DPP-IV инхибитори“

14:50 15:10 Валентин Карачобанов, М. Георгиева, Е. Матеев
„Синтез, моноаминооксидазна и антиоксидантна активност на нови пирол-базирани съединения“

15:10 15:30 Стефан Костов, М. Георгиева, Е. Матеев
„Молекулен докинг на пирол-базирани съединения в активния център на ацетилхолинестеразния ензим“

15:30 15:50 Виктория Георгиева, Ф. Маринов, И. Петров, К. Стоилов, Ц. Лажовски, П. Темнишки, С. Петрова, С. Симеонова, П. Георгиев, П. Мариновска, К. Балашев
„Златни наночастици: микробиологичен синтез с техни приложения в лъчетерапията“

15:50 16:10 Кафе-пауза

16:10 16:30 Reneta Koseva, N. Toshev, D. Cheshmedzhieva, Y. Uzunova, A. Maznikova, T. Dudev
„Structural diversity of zinc-binding groups acting as histone deacetylase inhibitors“

16:30 16:50 Antonia Maznikova, N. Toshev, D. Cheshmedzhieva, Y. Uzunova, R. Koseva, T. Dudev
„Binding mode of different zinc-binding groups to HDAC8“

16:50 17:10 Kristiyan Velichkov, N. Toshev, D. Cheshmedzhieva, Y. Uzunova, T. Dudev
„Chidamide as a prospective drug for cancer treatment: a DFT study“

17:10 17:30 Armina Abdollahi, N. Toshev, D. Cheshmedzhieva, Y. Uzunova, K. Mihalev, I. Iliev, S. Georgieva, T. Dudev
„Predicting antioxidant, antimicrobial and anticancer activity of isatin derivatives with DFT studies“

17:45 18:00 Закриване, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

18:00 Коктейл, пред 210 аудитория

СЕКЦИЯ КАТАЛИЗ

Павел Николов, ФХФ – СУ

Димитър Гагашев, ФХФ – СУ

Владимир Григоров, ФХФ – СУ

Ивета Стаменова, ФХФ – СУ

София Стефанова, ФХФ – СУ

ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ И КАТАЛИТИЧНА АКТИВНОСТ НА ОБЛЪЧЕН g-C₃N₄

Павел Николов, Йоана Захариева, Мартин Цветков

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

Един от методите, на който се възлагат много надежди за химическо третиране на различни отпадни води са различни фотокаталитични реакции, част от по-широкия клас на подобрените окислителни процеси (*Advanced oxidation processes*). За целта е необходим ефективен фотокатализатор – най-често полупроводник с подходяща ширина на забранената зона. Сред тези материали, графитоподобния въглероден нитрид (g-C₃N₄) се отличава като такъв с подходяща ширина на забранената зона (~ 2.8 eV), както и с възможността да се синтезира лесно. Известни са подобни реакции на разграждане на както органични^[1], така и неорганични замърсители.

Въпреки това, g-C₃N₄ има някои недостатъци, като например краткото време на живот на получените екситони под действието на светлина. Поради това се търсят различни стратегии за модифициране на структурата на фотокатализатора с цел да се подобрят неговите свойства. В настоящето изследване, модифицирането е извършено чрез облъчване с гама-лъчи, като са разгледани пет различни дози – 5, 10, 15, 20 и 25 kGy, като са сравнени с необлъчвана проба. Като източник на γ-лъчи е използван ⁶⁰Co. Освен като метод за модифициране, познаването на действието на облъчването върху g-C₃N₄ е важно, защото той се предлага и като катализатор за отстраняването на различни радионуклеиди (например редукция на U(VI) до U(IV)^[2]).

Получените проби са характеризирани с помощта на различни физични методи – PXRD, UV-Vis спектроскопия, като и SEM. Фотокаталитичната активност е изследвана чрез разграждане на багрилото Родамин Б, както в присъствие на пероксидимоносулфат, така и без. Установен е и механизма на фотокаталитичното разлагане.

Благодарности: Авторите изказват благодарност на средствата от проект КП-06-Н-89/1, финансиран от Фонд Научни Изследвания – МОН.

Цитати:

1. J. Wu et al, *Water Research X* (2025), vol. 28, 100315, doi:10.1016/j.wroa.2025.100315
2. X. Xu, Z. Wu et al, *Chemical Engineering Journal* (2024), vol. 496, 132023, doi:10.1016/j.seppur.2025.132023

ФЕНТЪН-ПОДОБНА КАТАЛИТИЧНА АКТИВНОСТ НА CuO ПОЛУЧЕН ОТ СОНО-СОЛВОТЕРМАЛНО СИНТЕЗИРАН Cu-MOF

Димитър Гагашев, Мартин Цветков

*Лаборатория по химия на редкоземните елементи, Факултет по химия и фармация,
Софийски университет "Св. Климент Охридски", София 1164,
mgagasev@gmail.com*

Опазването на околната среда и премахването на замърсители от въздух, вода и почва са едни от основните проблеми, върху които учените са се фокусирали през последните години. Един от начините за справяне с проблема са подобрените окислителни процеси. При тях под действието на катализатор се получават различни радикали, които могат да окислят замърсителя до друга по-безвредна негова форма или директно да го окислят до CO₂ и H₂O.

В този доклад са разгледани няколко метода на синтез на медни метал-органични рамки с различни лиганди (терефталова киселина и безнзен-1,3,5-трикарбоскилова киселина) и получените от тях при термично разлагане CuO. Синтезите на Cu-MOFs са проведени в ултразвукова вана при различни режими на работа, за да се определи влиянието на механичните вълни върху морфологията и каталитичното действие на катализаторите.

Синтезираните съединения са изследвани с различни физикохимични методи – XRD и SEM. Получени са подробни структурни и микроструктурни характеристики, както на получените метал-органични рамки, така и на производните им оксидите, като е направен опит за корелация между тях.

Изследвана е каталитичната активност на оксидите в реакция на разграждане на замърсител – антибиотик (сулфатиазол) и окислител – H₂O₂. Установена е разлика в степента на разграждане на замърсителя в зависимост от режима на работа на ултразвуковата вана. Сравнено е и представянето на катализаторите, получени от различни изходни метал-органични рамки, но при еднакви условия на синтез.

Благодарности: Авторите изказват своята благодарност за финансовата подкрепа по проект № КП-06-Н69/6 от 08.12.2022, финансиран от Фонд Научни изследвания.

ЕФЕКТ НА МОДИФИКАЦИЯТА С Ni^{2+} НА Gd_2CuO_4 ВЪРХУ КАТАЛИТИЧНОТО АКТИВИРАНЕ НА ПЕРОКСИМОНОСУЛФАТ

Владимир Григоров, София Стефанова, Мартин Цветков

*Лаборатория по химия на редкоземните елементи, Факултет по химия и фармация,
Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, 1164 София*
vladiborko@gmail.com

Фентъновите реакции се смятат за едни от най-обещаващите методи за пречистване на води от органични замърсители още от 1964 г., когато Ейзенханер, че те могат да бъдат използвани за тази цел. Класическите фентънови реакции включват използването водороден пероксид и протичат при ниско рН на средата, което ограничава тяхното практическо използване. В последните години интересът към сулфатнорадикаловите-Фентън-подобни реакции значително се увеличи поради факта, че те могат да бъдат прилагани в широк диапазон на рН, а освен това използваните окислителни като пероксимоно- и пероксидисулфат са стабилни твърди вещества, които могат да бъдат лесно транспортирани и съхранявани. Тяхното активиране обаче без наличието на катализатор е бавно и обикновено се осъществява при висока температура.

В настоящето изследване представяме за първи път приложението на модифициран с Ni^{2+} Gd_2CuO_4 като катализатор за активиране на пероксимоносулфат за разграждане на багрилото метиленово синьо. Получените катализатори са структурно и фазово охарактеризирани чрез прахова рентгенова дифракция. Резултатите от проведените каталитични изследвания показват, че материалите имат отлична каталитична активност във фентънова реакция за активиране на пероксимоносулфат. Определен и предложен е механизъм на реакциите чрез серия от експерименти с радикалови гасители.

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

СИНТЕЗ, ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ И КАТАЛИТИЧНИ СВОЙСТВА НА БИМЕТАЛНИ МЕТАЛ-ОРГАНИЧНИ РАМКИ ОТ ТИПА MIL-100

Ивета Стаменова, Димитър Гагашев, Мартин Цветков

*Лаборатория по химия на редкоземните елементи, Факултет по химия и фармация,
Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, 1164, София, България
iveta.stamenova18@gmail.com*

В последните години използването на метал-органични рамки като адсорбенти и катализатори предизвиква сериозен интерес в научното общество, поради добре изразената им порьозност водеща до добре развита повърхност.

Един от съществените проблеми при използването на метал-органични рамки за пречистване на води е тяхната нестабилност. Сред интересните през последните години метал-органични рамки е съдържащата Fe(III) MIL-100, която често е използвана за адсорбент [1], фотокатализатор [2] или катализатор за активиране на персулфатни съединения [3].

MIL-100 е метал-органична рамка, която е изградена от трицентрови μ_3 -O метални клъстери като вторични структурни единици (SBU), свързани помежду си с карбоксилни мостове от тримезилна киселина (1,3,5-трикарбокси бензоена киселина) [4].

Настоящото изследване цели да определи ефекта върху каталитичните и оптични свойства при заместване на Fe(III) с Cr(III) в MIL-100. За целта са синтезирани серия от MIL-100 метал-органични рамки с различно съотношение Fe(III)/Cr(III) с използването на хидротермален метод. Получените материали са охарактеризирани с прахова рентгенова дифракция, за определяне на фазовият състав, UV-Vis спектроскопия за определяне на ширината на забранената им зона и ИЧ спектроскопия. Получените материали са тествани в два вида фото-Фентън-подобни каталитични реакции за активиране на пероксомоносулфат и водороден пероксид за разграждане на антибиотика сулфотиазол. Определено е влиянието на заместването на Cr(III) върху каталитичната активност при активиране на двата вида окислителя.

Получените резултати показват потенциалното приложение на получените материали като катализатори за пречистване на води от органични замърсители

Благодарност: Авторите са благодарни за финансовата подкрепа на Фонд Научни Изследвания – МОН, договор №КП-06-Н69/6.

Използвана литература:

- [1] M. Du, G. Xu, J. Zhang, Y. Guan, C. Guo, Y. Chen, Hierarchically porous MIL-100(Fe) with large mesopores for cationic dye adsorption, *J Solid State Chem* 322 (2023) 123950. <https://doi.org/10.1016/J.JSSC.2023.123950>.
- [2] Z. Fang, M. Li, T. Li, C. Zhao, H. Liu, M. Huo, S. Dong, Enhancement of surface hydroxyl radicals generation triggered by OH-MIL-100(Fe) in photo-Fenton system, *Sep Purif Technol* 366 (2025) 132751. <https://doi.org/10.1016/J.SEPPUR.2025.132751>.
- [3] K.X. Shi, F. Qiu, J.W. Wang, P. Wang, H.Y. Li, C.C. Wang, Sulfamethoxazole degradation via peroxydisulfate activation over WO₃/MIL-100(Fe) under low power LED visible light, *Sep Purif Technol* 309 (2023) 122991. <https://doi.org/10.1016/J.SEPPUR.2022.122991>.
- [4] T. Steenhaut, Y. Filinchuk, S. Hermans, Aluminium-based MIL-100(Al) and MIL-101(Al) metal-organic frameworks, derivative materials and composites: synthesis, structure, properties and applications, *J Mater Chem A Mater* 9 (2021) 21483–21509. <https://doi.org/10.1039/D1TA04444C>.

СТРУКТУРНИ, ОПТИЧНИ И ФОТОКАТАЛИТИЧНИ СВОЙСТВА НА ТВЪРДИ РАЗТВОРИ ОТ ТИПА $\text{Sr}_{1-x}\text{Eu}_x\text{TiO}_3$

София Стефанова, Йоана Захариева, Мартин Цветков

*Лаборатория по химия на редкоземните елементи, Факултет по химия и фармация,
Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, 1164, София, България
sophia.stefanova@abv.bg*

Фотокаталитичното окисление на органични замърсители във води се смята за един от най-перспективните методи за тяхното окисляване, поради това че води до пълна минерализация на замърсителите с помощта на най-изобилният енергиен източник на планетата Земя – Слънцето.

Един от интересните през последните години фотокатализатори е смесенометалният оксид с перовскитова структура SrTiO_3 , който обаче освен широка забранена зона (3.20 eV) се характеризира и с бърза рекомбинация на фотогенерираните екситони, което значително понижава неговата каталитична активност.

В настоящето изследване чрез модифициран цитратен зол-гел метод са получени серия от катализатори от типа $\text{Sr}_{1-x}\text{Eu}_x\text{TiO}_3$, като целта на модифицирането с хетеровалентният Eu(III) е създаване на допълнителни нива в забранената зона, които да увеличат времето на живот на екситоните, което се очаква да подобри фотокаталитичната му активност. Получените материали са структурно и фазово охарактеризирани с помощта на прахова рентгенова дифракция, като с помощта на метода на Ритвелд е доказано успешно заместване на Sr(II) с Eu(III) . С помощта на UV-Vis спектроскопия е определена ширината на забранената зона на получените твърди разтвори като е доказано и наличието на нови нива в забранената зона, докато с помощта на флуоресцентна спектроскопия е определено времето на живот на фотогенерираните екситони. Всички материали са тествани във фотокаталитична реакция за разграждане на антибиотика тетрациклин при облъчване с UV-светлина. Определен е механизма на реакцията чрез серия от експерименти с молекули гасители.

Благодарности: Авторите изказват благодарност на средствата от проект КП-06-Н-89/1, финансиран от Фонд Научни Изследвания - МОН

СЕКЦИЯ НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Димитър Бойчев, ИЕЕС – БАН

Виктор Янев, ИОНХ – БАН

Калина Мяшкова, ФХФ – СУ

Иво Лозанов, ФХФ – СУ

Емил Кочев, ФХФ – СУ

Антоний Сурчев, ФХФ – СУ

ИНОВАТИВЕН ПОДХОД ЗА НАСТРОЙКА НА РЕГУЛАТОРА НА ЕМУЛАТОРЕН МОДУЛ НА АКУМУЛАТОРНИ БАТЕРИИ ПРИ ПРОЦЕС НА РАЗРЕЖДАНЕ

Димитър Бойчев, Благой Бурдин

*Институт по електрохимия и енергийни системи „Академик Евгени Бudevски“,
Българска академия на науките, София 1113, ул“ Акад. Георги Бончев“ бл.10,
d.boychev@iees.bas.bg*

Експерименталното развитие на техническата среда, в която акумулаторните батерии работят е свързано с редица технически неудобства. Съществен проблем представлява крайната стойност на капацитета на реален презареждаем акумулатор. След достигане на ограничителното условие за край на разрядния процес, той трябва отново да бъде зареден. Този процес от своя страна изисква необходимо време съгласно регламентирано предписание.

Много по-целесъобразно и технически издържано решение е използването на емулатор на съответния тип акумулатор. Предимството на този подход и начин на работа е, че изпитателната постановка придобива експериментална и функционална гъвкавост от една страна и икономическа ефективност от друга. За пример – емулаторът на акумулаторна батерия може да бъде „зареден“ мигновено до желана степен на зареденост (SOC). Освен това могат да бъдат зададени експлоатационни параметри като състояние на здраве на батерията (SOH), вътрешно съпротивление и др., както и същите да бъдат променяни в хода на експеримента.

Съществен интерес представлява емулирането на разрядния процес, който по същество определя поведението на акумулаторна батерия, поставена в реална техническа експлоатационна среда. В настоящата работа е представена схема на емулатор на презареждаем акумулатор. Като базов управляващ модул е използван ПИД регулатор. Особен интерес представлява настройката на компонентите на регулатора поради факта, че обектът за управление практически не съществува – той се емулира. Разработен е иновативен подход за точна настройка на основните компоненти на регулатора – времеконстанта на интегриране T_I и коефициент на пропорционалност K_P .

1. Imran Arif Abdul, [M. Moghavvemi](#) Optimization of PID Controller tuning method using Evolutionary Algorithms *IEEE 2021 Innovations in Power and Advanced Computing Technologies (i-PACT)* Date of conference 27-29 November 2021.
2. S. Minaei, E. Yuce, Simple Realizations of Current-Mode and Voltage-Mode PID, PI and PD Controllers, *Engineering Proceedings of the IEEE International Symposium on Industrial Electronics*, 20 June 2005.

ИЗСЛЕДВАНЕ НА Pr_6O_{11} КАТО ПОТЕНЦИАЛЕН ЗАМЕСТИТЕЛ НА CeO_2 В ЛИТИЕВО-ЙОННИ БАТЕРИИ

Виктор Янев, Мартин Недялков, Радостина Стоянова

*Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките,
ул. „Акад. Георги Бончев“, бл. 11, 1113 София,
viktorpya@abv.bg*

Въведение: Катодните материали обуславят енергийната плътност и цикличната стабилност на Li-йонните батерии. Поради тази причина, преходнометалните оксиди са обект на широко изследване. Класическите катодни материали разчитат на обратима литиева интеркалация и редоксдвойка на 3d-метал. Използването на 4d-метали във висши степени на окисление повишава енергийната плътност на материала. Li_2RuO_3 показва обратим капацитет от двуелектронен преход ($\text{Ru}^{6+}/\text{Ru}^{4+}$) [1]. Основен недостатък на материала се явява необратимото отделяне на кислород, което от една страна води до безвъзвратното намаляване на капацитета, а от друга – отделяне на газ в херметично затворената клетка. За да се предотврати този процес се търсят вещества, които могат обратимо да поглъщат кислород. Едно от най-наложилите се такива вещества е CeO_2 , а изследването на други кандидати не е добре изучено. От лантаноидите подходящи представители са Pr_6O_{11} и Tb_4O_7 . Празеодимовият оксид е използван успешно за каталитични и електрохимични цели и показва обещаващи резултати. Активирането на едноелектронен преход ($\text{Pr}^{3+}/\text{Pr}^{4+}$) по време на електрохимично циклиране позволява обратимо поглъщане на кислород, аналогично на цериевия оксид. Това породило изследване на системата от $\text{Li}_2\text{RuO}_3 + 5\% \text{Pr}_6\text{O}_{11}$.

Експериментална част: Чрез твърдофазен метод на синтез от Li_2CO_3 и RuO_2 на 800°C е получен чист Li_2RuO_3 [2]. Синтезиран е празеодимов нитрат, който е титруван обратно комплексометрично и така е определена кристализационната вода, която е 3,75. Покриването е извършено чрез метод на съутаяване.

Резултати: Пробите са охарактеризирани структурно и морфологично. Установихме, че празеодимовият хидроксид реагира още при 600°C с Li_2RuO_3 , при което се образува смесен оксид със състав $\text{Li}_2\text{Pr}_2\text{RuO}_6$ и перовскитов тип структура, който не е съобщен до сега в литературата. Предстои електрохимично охарактеризиране на композитната система в моделна електрохимична литиева клетка.

Цитати:

1. Yu, Yang et al, Chemistry of Materials, **2019**, vol. 31, 7864–7876
2. James, A. C. W. P., & Goodenough, J. B., Journal of Solid State Chemistry, **1988**, vol. 74, 287–294.

ПОЛИМЕРНО ИНКЛУЗИВНИ МЕМБРАНИ ЗА ТВЪРДОФАЗНА ЕКСТРАКЦИЯ НА ЙОНИ

Калина Мяшкова, Тони Спасов, Спас Колев

*катедра Приложна неорганична химия, Факултет по химия и фармация,
Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, 1164, София,
kimyashkova@gmail.com*

В отговор на нарастващите екологични предизвикателствата и необходимостта от устойчиви технологии за третиране на отпадъците от индустриалните производства и отпадъчните им води, настоящото изследване разглежда приложението на полимерно инклузивните мембрани (PIMs) за селективна твърдофазна екстракция на тиоцианатни йони. Тези мембрани представляват композит, съставен от базов полимер и вграден в полимерната мрежа екстрагент, който е селектиран така, че да образува комплекс с екстрахирания йон. Базовият полимер е структурният компонент на мембраната, осигуряващ нейните механични свойства. Така се постига устойчив, селективен и рентабилен метод за рециклиране на материали или отстраняване на замърсители от околната среда [Kolev, S. D. (2019). Membrane Techniques, Liquid Membranes. vol. 7, pp 1–9]. В настоящото изследване са синтезирани мембрани с три различни базови полимера – PVC, СТА и PVDF-HFP, като в мембраната е вграден екстрагента Aliquat 336. За изследване на ефективността на транспортните им свойства са проведени експерименти за извличане на тиоцианат от захранващ разтвор на амониев тиоцианат и приеман разтвор на натриев нитрат. Концентрациите на йоните в двата разтвора се проследява чрез измерване на абсорбцията на разтвор, в който е добавен железен нитрат с цел формиране на цветен комплекс на железните с тиоцианатните йони. Изследвана е и термичната стабилност на екстрагента в различните мембрани с цел получаване на ценна информация за възможно взаимодействие на екстрагента с полимера. Най-висока термична стабилност е установена при мембраната с базов полимер от PVDF-HFP. Резултатите от изследванията показват, че най-висока скорост на пренос и термична стабилност се наблюдава при PVDF-HFP мембраната. Също така е потвърдено, че полимерно инклузивните мембрани са обещаващ метод за селективно извличане на аниони от отпадни води.

Това изследване е финансирано от Европейския съюз-NextGenerationEU, чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Р. България, проект No BG-RRP-2.004-0008. Благодарност и към Фонд "Научни изследвания", договор № КП-06-Н89/10.

СИНТЕЗ, ФИЗИКОХИМИЧНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ТЕРМИЧНА СТАБИЛНОСТ НА РЕДУКТОРА LiH_2PO_2

Иво И. Лозанов¹, Божидар Митрев¹, Красимир Колев², Людмил Лютов^{1,2}

1 Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, ivoil@uni-sofia.bg

2 ИМСТЦХА „Акад. Ангел Балевски“, БАН, бул. „Шипченски проход“ 67, 1574, София

Литиевият хипофосфит (LiH_2PO_2) е слабо изучен представител на хипофосфитните соли, които са силни неорганични редуктори и намират приложение в различни иновативни електрохимични източници на ток. Основното предимство на повечето хипофосфити е, че са много разтворими във вода и се окисляват до безвредни фосфати дори под действието на средно силни окислители като например водороден пероксид (H_2O_2). Литиевият хипофосфит притежава най-ниската молекулна маса от всички хипофосфити и съответно висок теоретичен специфичен капацитет - 1489 mAh/g, правейки го перспективно гориво за електрохимични горивни клетки. Метод за синтез на LiH_2PO_2 от $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_2)_2$ и $\text{Li}_2\text{C}_2\text{O}_4$, както и данни за неговата кристална структура са представени в [1]. Настоящото изследване цели да допълни липсващата в научната литература информация относно изолирането, пречистването, охарактеризирането и стабилността на LiH_2PO_2 . За първи път са получени качествени и количествени данни за важни физикохимични свойства както на чистата сол, така и на нейни водни и алкохолни разтвори. Предложена е подходяща експериментална установка за измерване на разтворимост и термична стабилност на солта. Изследвани са продуктите на разлагане на LiH_2PO_2 след термична обработка на проби при зададени температури до 470 °C. Получените след обработката проби са охарактеризирани с прахова рентгенова дифракция, чрез която са открити фазите $\text{Li}_4\text{P}_2\text{O}_7$ и LiPO_3 . Направени са заключения за механизма на разпадане на литиев хипофосфит при нагряване в кислородна среда.

Цитати:

- [1] Naumov, D. Y., Naumova, M. I., Podberezskaya, N. V., & Kuratieva, N. V. (2004). *Lithium and beryllium hypophosphites*. *Acta Crystallographica Section C Crystal Structure Communications*, 60(8), i73–i75. doi:10.1107/s0108270104013691

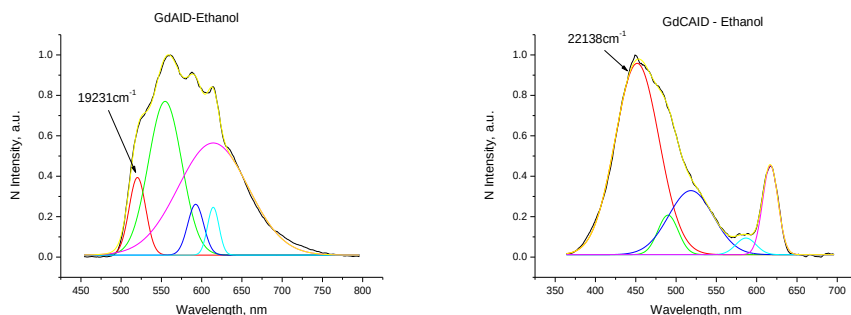
ИЗСЛЕДВАНЕ НА ФОТОАКТИВНИТЕ СВОЙСТВА НА ИНДАНДИОННИТЕ ПРОИЗВОДНИ И ПОТЕНЦИАЛА ИМ ЗА УСИЛВАНЕ ЛУМИНЕСЦЕНЦИЯТА НА ЛАНТАНОИДИ

Емил Кочев¹, Ивелина Георгиева², Деница Еленкова¹

- 1 Лаборатория по химия на редкоземните елементи, СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Неорганична Химия, 1164 София, бул. "Джеймс Баучер" №1, emilk.kochev@gmail.com
2 Институт по обща и неорганична химия, БАН, 1113 София, ул. „Акад. Г. Бончев“ 11

Лантанидните комплекси с антена-хромофори се характеризират с уникални луминесцентни свойства на Ln(III) (излъчване във видимата и близката инфрачервена област и тесни емисионни ивици)¹, усилен от координираните лиганди-хромофори. Тези комплекси намират приложение при разработването на нови оптични материали и технологии като OLEDs, селективни луминесцентни сонди с биологична структура, флуороимунологични агенти и други². Установено е, че β -дикетонатите са подходящи като: 1) лиганди за образуване на стабилни лантанидни комплекси; 2) хромофори, които интензивно поглъщат енергия в UV областта; 3) „антени“, които във възбудено състояние ефективно прехвърлят абсорбираната енергия към Ln(III).

Настоящото изследване е насочено към синтез на Ln(III) (Ln= Eu, Sm, Gd) комплекси с два β -дикетонатни лиганда (2-ацетил-1,3-индандион (AID) и 2-карбамидо-1,3-индандион (CAID)), установяване на оптичните им свойства с UV-Vis и фотолуминесцентна спектроскопия и оценка на потенциала на двата лиганда като „антени“ за усиление на луминесценцията на Ln(III) йони. Приложени са няколко синтетични процедури и са предсказани състава и структурата на получените комплекси. Gd(III) комплексите са използвани за експериментално определяне на енергията на триплетното състояние на лигандите (фиг. 1). Измерени са луминесцентните свойства във видимата област на получените Eu(III) и Sm(III) комплекси. Резултатите от оптичните изследвания са дискутирани по отношение на структурни и енергетични характеристики на комплексите и наблюдаваната луминесценция само при комплексите с AID.



Фиг.1. Фосфоресценция от GdAID и GdCAID в етанол.

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

Цитати:

1. S. Cotton, Lanthanide and Actinide Chemistry, Wiley, Second edition, 2024
2. C. Wei et al., Sci. China Technol. Sci., 2018, vol. 61, 1265–1285.

СТРУКТУРНИ И ОПТИЧНИ СВОЙСТВА НА ФЛУОРЕСЦЕНТНИ ПИРОГЕРМАНАТИ ОТ ТИПА $Gd_{2-x}Sm_xGe_2O_7$

Антоний Сурчев, Йоана Захаријева, Мартин Цветков

*Лаборатория по химия на рядкоземните елементи, Софийски Университет “Св.
Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация, София 1164, България
as31878@gmail.com*

Вещества със структура $A_2B_2O_7$ (пироклор) представляват голям интерес от още от средата на миналият век, поради своите химични и физични свойства.

Пирогерматите на рядкоземните като представители на смесенометалните оксиди с пироклорна структура позволяват да бъдат използвани за твърдофазни високотемпературно устойчиви матрици за луминесцентни материали. Голяма част от техните свойства могат да се променят в зависимост от концентрацията на рядкоземните елементи и/или тяхната замяна с друг.

В настоящото изследване се разглежда серия от твърди разтвори ($Gd_2Ge_2O_7$ – $Sm_2Ge_2O_7$), в която съотношението на гадолиний и самарий бива променяно с цел подобряване на флуоресцентните свойства. Получените образци биват подробно изследвани чрез голям брой физикохимични метода – XRD, TEM, XRF, UV-VIS и флуоресцентна спектроскопия.

По метод на Ритвелд е уточнена кристалната структура и микроструктурата на получените материали. Направена е връзка между наблюдаваните оптични свойства и кристалната структурна, като е проследено влиянието на модифициращия самариев йон.

Резултатите показват, че вграждането на малки количества (до $x=0.25$) $Sm(III)$ води до получаване на флуоресцентни материали, докато по-високите концентрации водят до гасене на флуоресценцията.

Благодарности: Антоний Сурчев е благодарен за финансовата подкрепа отпусната по програма на МОН „Млади учени и постдокторанти - 2“ от средствата, отпуснати на Факултета по химия и фармация към СУ.

СЕКЦИЯ МЕТОДИКА НА ОБУЧЕНИЕТО ПО ХИМИЯ

Елисавета Кожухарова, ФНОИ – СУ

Наско Стаменов, ФХФ – СУ

ХИМИЯТА АТРАКТИВНА В УЧИЛИЩЕ ЧРЕЗ STEAM И МЕДИЙНА ГРАМОТНОСТ.

Елисавета Кожухарова

Софийски Университет “Св. Климент Охридски”, Факултет по науки за образованието и изкуствата, София 1574, ул. Шипченски проход 69 А
ellie_kozuharova@abv.bg

Притеснителните резултати от PISA – Организацията за икономическо сътрудничество и развитие (ОИСР) недвусмислено показват, че обучението в задължително изучаваните предмети в училище има нужда от подобрене (включително и по природните науки), („Аз-буки“, 2022). Един от важните въпроси, на които трябва да си дадем отговор е по какви начини да изведем знанията на ниво ценности. Това поле на познанието, в което обучаемите приемат изучаваното не като задължение, а като възможност за лично развитие, себеутвърждаване и дори призвание. Химията не е просто предмет в училище и учениците трябва да виждат нейната практическа значимост като наука още преди да достигнат етапа, в който избират житейския си път. Използвайки този възглед върху образователния подход, настоящата разработка представя примерен урок по Химия чрез медийна грамотност и “STEAM”. Една от специфичностите на плана за урок е възможността учителят да го адаптира спрямо потребностите на традиционния учебен час и лесната достъпност и изпълнимост на заложеното в съдържанието.

Цитати:

1. L. Rutkowski & D. Rutkowski, *A call for a more measured approach to reporting and interpreting PISA results. Educational Researcher*, 2016, vol. 45 (4), 252-257.
2. „Аз-буки“ 06-12-2023 в Брой 49, 7 - 13.12.2023

UV-VIS СПЕКТРОФОТОМЕТРИЯТА В УЧИЛИЩЕ. ПРОБЛЕМИ И РЕШЕНИЯ

Наско Стаменов^{1,2}, Иво Лозанов¹

- 1 *Софийски Университет "Св. Климент Охридски", Факултет по химия и фармация, София 1164, България*
- 2 *Национална природо-математическа гимназия "Акад. Любомир Чакалов", София, ул. "Бигла" №52, nasko.stamenov@npmg.org*

Спектрофотометрията е аналитичен метод, който се е наложил в широка гама приложения. Поради своята значимост е включен в програмата по химия за втори гимназиален етап, като тема в модул 4 Методи за контрол и анализ на веществата. В българските училища се наблюдава проблем с достъпа до апарати, който води до разглеждане на спектрофотометрията единствено теоретично.

В настоящата работа се дава предложение как това да се промени. Разработена е методика за изпълнение на спектрофотометрично изследване с помощта на леснодостъпни материали и устройства, като данните и изводите от тези изследвания са сравнени с такива, получени от училищен спектрофотометър. Резултатите от сравнението са обещаващи и показват, че могат да бъдат проведени лабораторни уроци, при които да се спектрофотометрията да се разгледа практически.

СЕКЦИЯ ФИТОХИМИЯ И ФАРМАКОГНОЗИЯ

Мирослав Бояджиев, ФХФ – СУ

Сезан Ахмед, ХФ – ПУ

**ОЦЕНКА НА КОЛИЧЕСТВОТО ХИДРОКСИКАНЕЛЕНИ КИСЕЛИНИ И
ОПРЕДЕЛЯНЕ НА МИКРОМОРФОЛОГИЧНИ БЕЛЕЗИ ЗА БАЛКАНСКИ И ЧУЖДИ
РАСТИТЕЛНИ ВИДОВЕ ОТ ПОДСЕМЕЙСТВАТА НА LAMIACEAE**

Мирослав Бояджиев, Траян Груйкин, Асен Стоянов

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра „Органична химия и фармакогнозия“, Джеймс Баучер 1, 1164, София,
България, ohans@chem.uni-sofia.bg

Растителни вещества и препарати от Lamiaceae имат утвърдено фитотерапевтично приложение в традиционната медицина и участват в състава на продукти за съвременна терапия. Тези растения натрупват псевдотанини [1], като розмаринова и хлорогенна киселина, които имат антиоксидантна и ранозаздравяваща активност [2]. Малко сравнителни анализи са публикувани разглеждащи динамиката на натрупване при представители от различни подсемейства в рамките на Lamiaceae за балканите. Липсва сравнение на диворастящи и култивирани популации, оценка на влиянието на антропогенни фактори за рудерални видове. Целта ни е установяването на общо съдържание на хидроксиканелени производни, изразени като розмаринова и хлорогенна киселина за растителни вещества от Ajugoideae, Lamioideae, Nepetoideae, Scutellarioideae и Viticoideae. Второстепенна цел бе описването на диагностични белези за тези растителни вещества, които нямат установени монографии в Европейска фармакопея. Екстракти, приготвени с етанол 50% V/V, са третирани с водни разтвори на 0,5M HCl (Honeywell), 1:1 = NaNO₂:Na₂MNO₄, 8,5% NaOH (Honeywell), след което е измерена абсорбция при 505 и 525 nm (SHIMADZU UV-1202) [3]. Микроскопски препарати са приготвени с 4 g/mL хлоралхидрат (Honeywell), заснети и анализирани в светло поле с Zeiss Primostar iLED и Labscope 4.4.0. Наблюдават се значителни междувидови разлики в диагностичните белези и динамиката на натрупване на фенолни производни (*Teucrii polii herba* - розмаринова киселина 3,44±0,09%; *Teucrii chamaedrys herba* 7,23±0.17%). Растителни вещества от Lamioideae и Viticoideae натрупват под границата на количествено определяне на псевдотанини. Географският произход, първичната обработка и периода на съхранение са основни фактори, влияещи върху съдържанието на хидроксиканелени киселини.

Цитати:

1. M.B. Štefan, J.V. Rodríguez, B. Blažeković, M. Kindl, S. Vladimir-Knežević. Total Hydroxycinnamic Acids Assay: Prevalidation and Application on Lamiaceae Species. *Food. Anal. Methods.* vol. 7, 326–336
2. A. Erdal, D. Özdemir, S. Özdemir, M. Bakırtaş, İ. Ağrı. The Effect of Rosmarinic Acid on Wound Healing of Nasal Mucosa in the Rats. *Am. J. Rhinol. Allergy.*, 2024; vol. 38, 133-139
3. Ph. Eur. 11.0, 1560 (01/2013)

ИЗСЛЕДВАНЕ ПОТЕНЦИАЛА НА ДЪЛБОКО ЕВТЕКТИЧНИ РАЗТВОРИТЕЛИ ЗА ЕКСТРАКЦИЯ НА ПОЛИФЕНОЛИ ОТ ЛИСТАТА НА СМОКИНЯ (*FICUS CARICA*)

Сезан Ахмед, Димитър Божилов, Станимир Манолов, Илиян Иванов

Пловдивски университет „Паисий Хилендарски, Химически факултет,
ул. „Цар Асен” 24, Пловдив 4000
skank1998@uni-plovdiv.bg

Дълбоко евтектичните разтворители (DES) и в частност природните дълбоко евтектични разтворители (NADES) се разглеждат като перспективни алтернативи на традиционните органични разтворители за екстракция на полифеноли. Те притежават редица предимства, сред които висока екстракционна ефективност, която може да бъде допълнително оптимизирана чрез ултразвукова екстракция. DES представляват комбинация от донори и акцептори на водородни връзки, съчетани в строго дефинирани моларни съотношения, което води до понижаване на точката на топене на системата и увеличаване на разтворимостта на биоактивните съединения. Редица растения са широко използвани в традиционната медицина поради своите лечебни и терапевтични свойства, сред които се откроява смокиновото дърво (*Ficus carica*), принадлежащо към семейство *Moraceae*. Листата му традиционно се прилагат под формата на настойки и отвари за лечение на тумори и възпалителни заболявания, профилактика на хранителна анемия, като противоглистно средство, за регулация на холестерола, поддържане на сърдечно-съдовата функция и при диабет. Фитохимичните проучвания върху *Ficus carica* показват наличие на фенолни съединения с доказана фармакологична активност. Тези биологично активни съединения определят високата терапевтична стойност на *Ficus carica* и обуславят потенциала на растението като източник на натурални антиоксиданти и противовъзпалителни агенти.

СЕКЦИЯ ОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Дона Саралиева, ФХФ – СУ

Бойко Василев, ФХФ – СУ

Никол Димова, ФХ – ПУ

Изабела Танева, ФХФ – СУ

Мария Иванова, ФХФ – СУ

ПОЛУЧАВАНЕ НА КУМАРИНФОСФОНИЕВИ СОЛИ И РЕАКЦИИ С АРОМАТНИ АЛДЕХИДИ

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
dona.saralieva@gmail.com*

Настоящите изследвания представят няколко възможности за получаване на кумаринфосфониеви соли от бромозаместени кумарини. Представителите на тези соли са потенциални прекурсори на фосфорни илиди и според направената литературна справка не са активно изследвани в условия за реакцията на Витиг при кумарини. Участието на *in situ* получени от нас илиди са предварително тествани с ароматни алдехида.

В резултат от направените изследвания са моделирани спрегнати системи на основата на кумарини. Изследвано е влиянието на базата, разтворителя и температурата за получаване на целевите съединения. Разгледан е и стереохимичният ход на осъществените реакции с формиране на π -диастереоизомери. Установена е транс (*E*) – конфигурация на получените съединения, потвърдена чрез ЯМР спектри.

Проучванията откриват възможности за по-нататъшно структурно разнообразие на съединения от стилбенов тип с включен кумаринов фрагмент чрез подходящ избор на заместители и модификации, както и за изследване на техните фотофизични и биологични свойства. Взаимното разположение на заместителите определя потенциалната биологична активност на получените съединения, които се причисляват към групата на стилбеновите съединения и комбретастатин А-4 като основен представител.

Авторите изказват благодарност на:

Инфрамат – Националната пътна карта за научна инфраструктура (ПМС No 354 от 29.06.2017 г.) – Министерство на образованието и науката (Договор Д01-155/28.08.2018); Проект 2025 г. към Софийски Университет „Св. Климент Охридски“

АЦИДОХРОМНИ СТИРИЛХЕМИЦИАНИНОВИ БАГРИЛА С (E)-3-АЛКИЛ-2-(4-(4-ФЕНИЛПИПЕРАЗИН-1-ИЛ)БЕНЗО[D]ТИАЗОЛ-3-ИЕВ ХРОМОФОР ЗА ВИЗУАЛИЗИРАНЕ НА СВОБОДНА ДНК В КИСЕЛА СРЕДА

Бойко Василев^{1,2}, Алексей Василев^{1,2}

- 1 Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, бул. „Джеймс Баучер“ 1, 1164 София, България; boyko.vasilev03@gmail.com
- 2 Институт по полимери, Българска академия на науките, Гео Милев, ул. „Акад. Георги Бончев“ бл. 103, вх. А, 1113 София; alavasilev@gmail.com

Извънклетъчното рН на твърдите тумори е киселинно, вариращо от 6,5 до 6,9, докато рН на нормалните тъкани е значително по-алкално, от 7,2 до 7,4 [1,2]. Този феномен се обяснява с комбинация от високи нива на производство на млечна киселина (последствие от ферментативен гликолитичен метаболизъм) и лоша перфузия (процес на доставяне на хранителни продукти и кислород). Съгласно хипотезата за туморна инвазия, туморите експортират киселина в околния паренхим, където тази киселина индуцира нормална клетъчна смърт и насърчава разграждането на извънклетъчния матрикс чрез стимулиране на освобождаването на протеази посредством повишено лизозомно рециклиране [1,2]. Друг важен феномен, наблюдаван в туморна тъкан и флуидика, е високото количество свободна ДНК, дължащо се на лизиране на клетки и изявена апоптоза. Изброените характеристики на туморните тъкани ни амбицираха в търсенето на нови флуорогенни туморни тракери, опериращи като т.нар. биомолекулни логически порти “*biomolecular logic gates*”. В настоящата работа демонстрираме подобрена процедура за синтез и пречистване на стирилхемицианинови багрила с (E)-3-алкил-2-(4-(4-фенилпиперазин-1-ил)бензо[d]тиазол-3-иев скелет в комбинация с нова процедура за бързо характеризиране на фотофизичните свойства на нови флуорохроми в буферни разтвори с различно рН в присъствие на ДНК.

Литература:

1. S.R. Pillai, M. Damaghi, Y. Marunaka, et al. Causes, consequences, and therapy of tumors acidosis. *Cancer Metastasis Rev* 2019, 38, 205–222. <https://doi.org/10.1007/s10555-019-09792-7>
2. A. Ibrahim-Hashim, V. Estrella. Acidosis and cancer: from mechanism to neutralization. *Cancer Metastasis Rev* 2019 38, 149–155. <https://doi.org/10.1007/s10555-019-09787-4>

Благодарности: Изказваме благодарности за финансирането на научните изследвания по проект „Флуорогенни наноструктурирани биосъвместими полимерни материали за анализ на нуклеинови киселини“, КП-06-Н89/3-05.12.2024 (PolyFluorNA) на Фонд научни изследвания към Министерство на образованието и науката.

СИНТЕЗ НА НОВИ ТРИМЕТАЗИДИНОВИ ПРОИЗВОДНИ С ПРОФЕНИ

Никол Димова, Дияна Димитрова, Станимир Манолов, Димитър Божилов, Илиян Иванов

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

Триметазидинът **1** (Схема 1) е първият регистриран антиангинален агент, класифициран като метаболитен модулатор, който защитава сърцето от исхемични увреждания и оксидативен стрес чрез насочване на метаболизма към усвояването на глюкоза.

От друга страна, производните на 2-арилпропионова киселина, които принадлежат към групата на нестероидните противовъзпалителни средства, са предпочитани заради аналгетичните, противовъзпалителните и антипиретични им свойства.

Комбинирането на триметазидин с профени (Схема 1) е иновативен подход за създаване на хибридни молекули, които съчетават метаболитната модулация на триметазидин с противовъзпалителните и аналгетични свойства на профените.

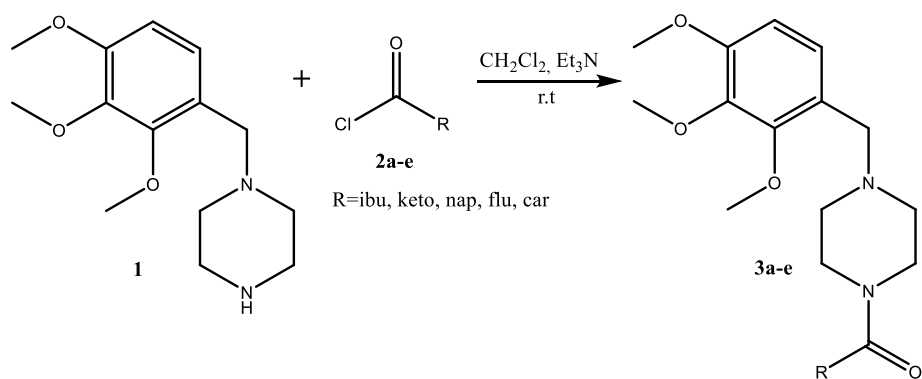


Схема 1. Синтез на нови триметазидинови хибридни молекули.

В този контекст успешно са синтезирани серия от нови производни на триметазидин, включващи различни профени, предлагайки обещаващи перспективи за лечение на комплексни патологии.

СИНТЕЗ И ПРИЛОЖЕНИЕ НА НОВИ ЗАМЕСТЕНИ БЕНЗИМИДАЗОЛИ, БЕНЗИЛИДЕНМАЛОНОНИТРИЛИ И ПИРАЗОЛИНИ

Изабела Танева¹, Меглена Къндинска¹, Траяна Недева², Теменужка Радойкова³,
Стела Георгиева³, Xi Wang⁴, Manli Wang⁴

- 1 СУ „Св. Кл. Охридски“, ФХФ, бул. „Дж. Баучер“ № 1, София 1164, ibtaneva@gmail.com; ohmk@chem.uni-sofia.bg;
- 2 СУ „Св. Кл. Охридски“, БФ, бул. „Др. Цанков“ №8, София 1164, nedeva.ts@gmail.com;
- 3 ХТМУ-София, Факултет по химични технологии, бул. „Кл. Охридски“ № 8, София 1797, st.georgieva@uctm.edu; nusha_v@uctm.edu;
- 4 Wuhan Institute of Virology, CAS, PRC, wangml@wh.iov.cn; wangxi@wh.iov.cn

Бензимидазоловата и пиразолиновата хетероциклени пръстенни системи се свързват с проявата на широк спектър от биологични активности [1, 2]. Разнообразието в потенциала на двата хетерцикъла са причина те да се разглеждат като привилегирани структури за биоорганичната и медицинската химия. Приложението на редица бензимидазолови и пиразолинови лекарствени препарати в практиката и разнообразието в биологичните свойства на тези съединения са причина за нестихващия научен интерес към тях и са основание за модифициране на хетеропръстените в търсене на нови области на биоприложение и/или подобряване на вече известни.

С настоящото изследване представяме синтетичните подходи за лесен достъп до нови производни на бензимидазола и 2-пиразолина и ефективността им като антимикробни или противовирусни средства. С получаването на серия бензилиденмалононитрили демонстрираме не само потенциала им за превръщане в биоактивни полизаместени хетероцикли, но и приложението им като сензори за откриване на метални йони в различни среди.

Литература:

1. M. Tonelli, M. Simone, B. Tasso, F. Novelli, V. Boido, F. Sparatore, G. Paglietti, S. Pricl, G. Giliberti, S. Blois, C. Ibba, G. Sanna, R. Loddo, P. La Colla, *Bioorg. Med. Chem.*, 2010, vol. 18(8), 2937-53
2. N. Bhupender, R. Sandeep, J. Shalini, K. Bhupinder, S. Gurpreet, M. Vikramdeep, *Eur. J. Med. Chem.*, 2020, vol. 205, 112666

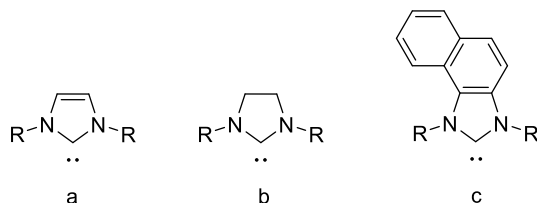
Благодарности: Изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на проект на Европейския съюз – NextGenerationEU чрез Националния план за възстановяване и устойчивост на Република България, проект SUMMIT BG-RRP-2.004-0008-C01 и са част от реализацията на COST Акция 22102.

СИНТЕЗ НА НОВИ НАФТО[1,2]ИМИДАЗОЛИ, НАФТО[1,2]ИМИДАЗОЛИЕВИ СОЛИ И НАФТОИМИДАЗОЛИЛИДЕНОВИ ПАЛАДИЕВИ КОМПЛЕКСИ С ПОТЕНЦИАЛНО ПРИЛОЖЕНИЕ В ПАЛАДИЙКАТАЛИЗИРАНИ РЕАКЦИИ

Мария Иванова, Румен Ляпчев

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Органична химия и фармакогнозия, София,
бул. Джеймс Баучър 1, София 1164
maria.ivanovaa15@gmail.com*

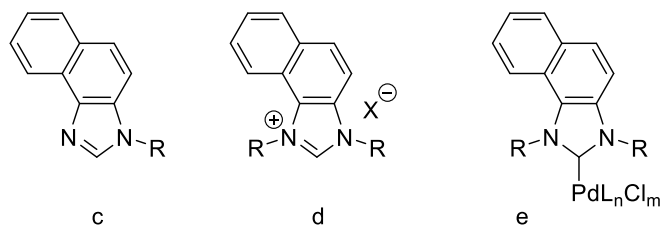
Най-добре изучените N-хетероциклени карбени и съответно, карбенови комплекси, са производни на имидазолилидените (a) и дихидроимидазолилидените (b):



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. Тя най-често се осъществява чрез кондензиране на имидазоловия пръстен с ароматна система. Такива N-хетероциклени карбени, притежават специфични свойства, различаващи се от тези на некондензираните представители. При всички тях, обаче, имидазоловият пръстен е разположен симетрично спрямо ароматната система.

Настоящият доклад е посветен на слабоизвестни карбенови структури, а именно нафтоимидазолилидените. При тях имидазоловият пръстен е кондензиран с нафталенова система през нейните първа и втора позиция (c).

В рамките на това изследване беше разгледан синтезът на нови нафто[1,2]имидазоли (c), нафто[1,2]имидазолиеви соли (d) и нафтоимидазолилиденеви паладиеви комплекси (e) с потенциално приложение в паладийкатализираните реакции.



СЕКЦИЯ ПОЛИМЕРИ

Савина Колева, ФХФ – СУ

Явор Христов, ИП – БАН

Крум Александров, ИП – БАН

Анна Пранчева, ИП – БАН

ХОМО- И СЪПОЛИМЕРИ НА СУЛФОБЕТАИН МЕТАКРИЛАТ И N,N'- ДИМЕТИЛАКРИЛАМИД КАТО НОВИ СИСТЕМИ ЗА МОДИФИЦИРАНО ОСВОБОЖДАВАНЕ НА РУТИН ХИДРАТ

Савина Колева, Деница Николова, Елена Василева

Лаборатория по структура и свойства на полимерите, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучер № 1, София, България, savi.koleva02@gmail.com

Полицвитерйоните (ПЦЙ) са клас биосъвместими полимери, характеризиращи се с липса на цитотоксичност и незначителна имуногенност. Едновременно с това, те са чувствителни към промени в параметрите на околната среда, като например рН, температура и солева концентрация. Поли(сулфобетаин метакрилатът) (ПСБ) е един от най-широко използваните ПЦЙ, а неговите приложения като интелигентен материал в медицината са свързани и с използването му като носител на биоактивни вещества (БАВ). Съполимеризацията на ПСБ с по-хидрофобен мономер, например с N,N'-диметилакриламид, дава възможност за получаването на системи за лекарствено доставяне с контролируем хидрофилно-хидрофобен баланс, а по този начин за разширяване на диапазона от БАВ, за които те могат да бъдат използвани.

Рутин хидратът (РХ) е флаваноид, производно на кверцетина. Той се характеризира с по-висока биоактивност поради по-силно изразената си хидрофилност. Известно е, че РХ притежава противовъзпалително, антиоксидантно и антибактериално действие, в това число и срещу *Staphylococcus aureus*. Въпреки че тази бактерия е част от нормалната микробиота в човешкия организъм, при определени обстоятелства тя би могла да предизвика сериозни инфекции, като например прогресиране на инфекции в повърхностни рани и раздразнения на кожата.

В рамките на това изследване, успешно бяха синтезирани хомополимери и серия от съполимери на сулфобетаин метакрилат и N,N'-диметилакриламид чрез свободна радикалова полимеризация. Беше изследвана тяхната способност да откликват на промяна в температурата, солевата концентрация и поведението им в синтетична пот. Получените полимери бяха успешно натоварени с рутин хидрат и бяха определени техните ефективност и капацитет на натоварване.

Благодарности: Това изследване е осъществено с финансовата подкрепа на Фонд Научни изследвания, програма M-ERA.NET, Договор № КП-06-ДО02/4.

СИНТЕЗ НА НОВИ ЦИКЛИЧНИ ПОЛИМЕРНИ „ЧЕТКИ“ ОТ СЪПОЛИМЕРИ НА 2-ХИДРОКСИЕТИЛ МЕТАКРИЛАТ И МЕТИЛ МЕТАКРИЛАТ ЗА ПОТЕНЦИАЛНИ БИОМЕДИЦИНСКИ ПРИЛОЖЕНИЯ

Явор Христов, Ерик Димитров, Сибела Долева, Наталия Тончева-Мончева, Христо
Новаков, Станислав Рангелов

*Институт по полимери, Българска академия на науките, ул. „Акад. Георги Бончев“,
бл. 103, вх. А, София 1113, office@polymer.bas.bg*

Насоченото доставяне на лекарства е една от най-бързо развиващите се области в съвременната фармацевтична наука. Цикличните полимерни „четки“, които представляват полимерни цикли с гъсто присадени странични полимерни вериги, предизвикват академичен интерес поради своята уникална топология и потенциал за приложение в доставянето на лекарства, наномедицината и получаването на нови материали.

В настоящото изследване е представена синтетична схема, по която успешно са получени нови циклични полимерни „четки“, съдържащи циклизиращи съполимери на поли(2-хидроксиетил метакрилат) (PHEMA) и поли(метил метакрилат) (PMMA). За присаждането на страничните вериги са използвани два подхода – „присаждане от“ („grafting-from“) и „присаждане-върху“ („grafting-onto“), които позволяват прецизен контрол върху състава, молекулната маса и гъстотата на присаждане. Чрез този двоен подход могат да се проектират циклични полимерни „четки“ със свойства, които могат да бъдат контролирани, разширявайки потенциалните им приложения в насоченото доставяне на лекарства и в други биомедицински области.

Благодарност: Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа по проект КП-06-Н89/2 Циклични полимерни "четки" – иновативни платформи за синтез на сферични нуклеинови киселини и доставяне на лекарства и полинуклеотиди на ФНИ.

СИНТЕЗ НА ПОЛИМЕРНИ АМФИФИЛИ ЗА МОДИФИКАЦИЯ НА ПОВЪРХНОСТТА НА НИОЗОМИ

Крум Александров¹, Ерик Димитров¹, Наталия Тончева-Мончева¹, Павлета Шестакова^{2,3}, Станислав Рангелов^{1,3}

- 1 *Институт по полимери, ул. „Акад. Георги Бончев“ бл. 103, вх. А, 1113 София, office@polymer.bas.bg*
- 2 *Институт по органична химия с център по фитохимия, ул. „Акад. Георги Бончев“ 9, 1113 София, office@orgchm.bas.bg*
- 3 *Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“ (БИОРЕСУРСИ БГ), проект BG16RFPR002-1.014-0001, София 1000, България*

Насоченото доставяне на биологично активни вещества представлява интерес на съвременната фармацевтична наука и технологии. Ниозомите, които представляват везикуларни структури, съставени от нейонни повърхностно активни вещества и холестерол и предлагат множество предимства като носители на биологично активни вещества, включително съвместно доставяне на липофилни и хидрофилни съединения, биосъвместимост, ниска имуногенност, стабилност (физическа, химическа и осмотична), както и свойства за контролирано освобождаване и насочване, привличат значителен академичен интерес. Мембраните на ниозомите могат да бъдат модифицирани чрез включване на подходящо функционализирани полимери по тяхната повърхност. Този подход отваря множество възможности за създаване на високоефективни носители, които също могат да контролират освобождаването на натоварените лекарствени вещества. В този контекст, чрез използване на контролирани полимеризационни процеси (анионна полимеризация, радикалова полимеризация с пренос на атом, катионна полимеризация с отваряне на пръстен) и реакции на "клик" химията (азид-алкин циклоприсъединяване) са синтезирани поредица от полимерни амфифили, състоящи се от нефосфолипиден липидоподобен остатък, конюгиран с различни полимери – поли(етиленов оксид), полиглицидол, поли(акрилова киселина), поли(2-изопропил-2-оксазолин) и поли(етилтриетиленгликол акрилат), използвайки. „Клик“ реакциите са проследени чрез гелово проникваща хроматография и протонен ядреномагнитен резонанс (ЯМР). Други ЯМР техники (COSY, HSQC, HMBC, и DOSY) са използвани за валидиране на „клик“ реакциите и успешния синтез на липи-полимерните конюгати.

Благодарност: Авторите изказват благодарност на Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“ (БИОРЕСУРСИ БГ), проект BG16RFPR002-1.014-0001, финансиран от ОП „Научни изследвания, иновации и дигитализация за интелигентна трансформация“ 2021-2027, съфинансиран от Европейския съюз.

СИНТЕЗ И АНАЛИЗ НА НАНОРАЗМЕРНИ КОМПЛЕКСИ ОТ КАТИОННИ ПОЛИМЕРНИ МИЦЕЛИ И ПРОТЕОЛИТИЧЕН ЕНЗИМ СЕРАТИОПЕПТИДАЗА, ПОКРИТИ С ХИАЛУРОНОВА КИСЕЛИНА

Анна Пранчева¹, Катя Каменова^{1,2}, Петър Петров^{1,2}

1 Институт по полимери, БАН - ул. „Акад. Георги Бончев“ бл. 103, вх. А, 1113 София

2 Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на биоресурси и отпадъци от лечебни и ароматни растения за иновативни биоактивни продукти” (БИОРЕСУРСИ БГ), 1000 София, България

Ензимната терапия е неразделна част от съвременната медицина, благодарение на високата селективност, ефективност и профил на безопасност. Въпреки множеството предимства, тя остава предизвикателство поради краткия *in vivo* полуживот и ниската бионаличност на ензима, а в някои случаи предизвиква реакциите на имунната система на пациента. Използването на наноразмерни носители е обещаващ подход за преодоляване на тези ограничения чрез подобряване на фармакокинетиката и фармакодинамиката на биоактивното вещество.

Настоящото изследване е фокусирано върху разработването на полиелектролитни комплекси на основата на катионни полимерни мицели и протеолитичния ензим сератиопептидаза (SER), частично покрити с хиалуронова киселина (НА). Катионните мицели бяха получени чрез самоасоцииране във водна среда на триблоков съполимер поли(2-(диметиламино)етилметакрилат)-блок-поли(ε-капролактон)-блок-поли(2-(диметиламино)етилметакрилат) (*PDMAEMA*₁₇-*b*-*PCL*₇₀-*b*-*PDMAEMA*₁₇). Предполагамата структура на мицелите е съставена от биоразградимо хидрофобно *PCL* ядро и хидратирана *PDMAEMA* обвивка. SER бе имобилизирана в обвивката на мицелите чрез електростатични взаимодействия, след което получените наноконструкции бяха покрити с НА чрез формиране на полийонен комплекс между положително заредените *PDMAEMA* вериги и отрицателно заредените вериги на НА. Размерът и зета потенциалът на получените комплекси бяха определени чрез динамично и електрофоретично разсейване на светлината. Колоидната стабилност на комплексите и протеолитичната активност на SER бяха определени преди и след покриването на комплексите с НА. Установено беше, че комбинацията от катионни мицели и НА запазва ензимната активност на SER за период от 30 дни.

Благодарности: Авторите изказват благодарност за финансовата подкрепа на Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“ (БИОРЕСУРСИ БГ), проект BG16RFPR002-1.014-0001, финансиран от ОП „Научни изследвания, иновации и дигитализация за интелигентна трансформация“, съфинансиран от ЕС.

СЕКЦИЯ БИОХИМИЯ

Трифон Попов, МУ – София

Ива Райкова, Ана Атанасова, БТУ – Бургас

ЕНЕРГИЯ НА АСОЦИАЦИЯ НА НОРМАЛЕН И МУТАНТЕН КОАГУЛАЦИОНЕН ФАКТОР VIII С ФАКТОР IX И ФАКТОР НА ФОН ВИЛЕБРАНД ПРИ ХЕМОФИЛИЯ ТИП А

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

- 1 Медицински факултет, Медицински университет – София, ул. „Здраве“ 2, 1431 София, България; popov.trifon@gmail.com
- 2 Катедра по медицинска физика и биофизика, Медицински университет - София, ул. „Здраве“ 2, 1431 София, България; svhristova@medfac.mu-sofia.bg
- 3 Научноизследователски сектор, Софийски университет „Св. Кл. Охридски“, бул. „Драган Цанков“ № 8, 1164 София, България; amzhivkov@gmail.com

Хемофилия А е X-свързано заболяване на кръвосъсирването, което се характеризира с качествен и количествен дефицит на фактор VIII (FVIII) в резултат на различни мутации в гена на FVIII. Вследствие на това се нарушава вътрешният път на коагулационната каскада. При 40-50 % от пациентите с тежка форма на хемофилия А се наблюдава инверсия на интрон 22 (inv22).

Целта на настоящото изследване е да се сравнят термодинамичната стабилност и електричните свойства на нормалния FVIII (nFVIII) и FVIII с инверсия 22 (invFVIII). Изследваме също така взаимодействието на nFVIII и invFVIII с фактора на фон Вилебранд (VWF) и фактор IX (FIX).

Сравнението на 3D структурата на нормалния активиран фактор VIII (FVIIIa) и на мутантния invFVIII показва, че в invFVIII липсва доменът C2, а доменът C1 е скъсен и променен. Това е очевидната причина за невъзможността мутантният invFVIII да образува комплекс със своя носител фактора на фон Вилебранд (vWF), който се свързва с домейните C1 и C2 на нормалния FVIIIa, предпазвайки FVIII от протеолитичните ензими в кръвната плазма. Изчисляването на енергията на асоциация потвърждава количествено този извод: константите на дисоциация на комплекса invFVIIIa-vWF и нормалния FVIIIa-vWF са съответно $3.5 \times 10^{-11} \text{ mol/L}$ и $4.6 \times 10^{-14} \text{ mol/L}$ при физиологично pH 7,4. Т.е., за да се постигне равновесие между комплекса invFVIIIa-vWF и свободните белтъци invFVIIIa и vWF, е необходимо да се достигне около 7600 пъти по-висока концентрация на мутирания фактор invVIIIa в сравнение с нормалния му аналог. От друга страна, образуването на комплекса (теназа) на фактор invVIIIa с активирания фактор IXa не се повлиява, тъй като FIXa се свързва с домейните A2 и A3 на FVIIIa или invVIIIa. Тази констатация разкрива причината за клинично наблюдаваната ниска ензимна активност на фактор VIIIa, която е под 1% при тежката форма на хемофилия А, в сравнение с активността му при здрави хора.

В заключение, инверсия 22 на гена FVIII води до образуването на несвършен протеин invFVIIIa, който не може да се свърже със своя протектор-носител vWF, което води до скъсен циркулаторен полуживот и силно намалена плазмена концентрация и ензимна активност на invFVIIIa в сравнение с нормалния FVIIIa.

ЗНАЧЕНИЕ НА ИЗВЪНКЛЕТЪЧНИЯ МАТРИКС ПРИ РАЗВИТИЕТО НА ТУМОРНИ ЗАБОЛЯВАНИЯ

Ива Райкова¹, Ана Атанасова¹, Марина Янева², Йордан Георгиев^{2*}

- 1 *Студент от специалност „Медицина“, Медицински факултет, Бургаски държавен университет „Проф. д-р Асен Златаров“, бул. „Проф. Яким Якимов“ №1, Бургас, п.к. 8010, ivaraykova44@abv.bg; anaatanasova135@gmail.com*
- 2 *Катедра „Химия, биохимия, биология и микробиология“, Медицински факултет, Бургаски държавен университет „Проф. д-р Асен Златаров“, marinaianeva@abv.bg; yordan.georgiev@uniburgas.bg (*автор за кореспонденция)*

Извънклетъчният матрикс (ИКМ) представлява сложна динамична мрежа от биополимери, които поддържат структурната цялост на тъканите и регулират клетъчните функции. В нормални условия той играе ключова роля в развитието и диференциацията на клетките, но при туморогенеза претърпява значителни промени, които могат да улеснят растежа и разпространението на злокачествени клетки. Разбирането на биохимичните и биофизичните изменения в ИКМ при туморни заболявания е от съществено значение за разработването на нови терапевтични стратегии. Ето защо целта на настоящия обзор е да се анализира значението на биохимичните нарушения в структурата и функцията на ИКМ при развитие на онкологичен процес. Анализирани бяха научни публикации по темата от рецензирани списания, публикувани в периода 2009-2025 г. Измененията във вискоеластичността на ИКМ играят критична роля при развитието на тумори, а параметри като поръзност, пропускливост, твърдост и дължина на нанофибриите на макромолекулите влияят върху клетъчната миграция и метастазиране. Промените в състава на ИКМ включват вариации в структурата на гликопротеини, протеоглики, интегрини и адхерини, което влияе на клетъчната адхезия и междуклетъчната комуникация. Метаболитната активност на фибробласти, макрофаги, неутрофили и Т клетки е ключова в ремоделирането на ИКМ. В резултат се създава благоприятна микросреда за туморите, подпомагаща тяхното развитие. Определени лекарства, насочени към понижаване на образуването на TGF- β , TNF- α , VEGF, PDGF, някои металопроотеинази, интегрини или потискане на MAPK, NF- κ B и mTOR сигнални пътища, водещи до контрол на възпалението и клетъчния растеж, показват потенциал в онкотерапията. Дълбочинното разбиране на молекулните механизми, свързани с измененията в ИКМ и механотрансдукцията при здрави и туморни клетки, може да допринесе за разработването на по-ефективни стратегии за лечение на онкологични заболявания.

СЕКЦИЯ ФИЗИКОХИМИЯ

Васил Иванов, ФМИ – СУ

Валентина Милева, ФХФ – СУ

СТАТИКА И ДИНАМИКА НА ФОРМИРАНЕТО НА ГРУПИ ОТ СТЪПАЛА ТИП „СТОЯНОВ“ ВЪРХУ КРИСТАЛНИ ПОВЪРХНОСТИ

Васил Иванов¹, Веселин Тончев²

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

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

Групирането на стъпала върху вицинални кристални повърхности е наблюдавано и описано за пръв път от Латишев¹ през 1989 г. върху Si(111), което дава началото на нова област от изследвания в кристалния растеж. Основополагащ за разбирането на процеса на групиране е предложеният почти десетилетие по-късно модел на Стоянов-Тончев (ST)¹ от 1998 г. ST е аналитичен модел, получен като нелинейно ЧДУ от четвърти ред за еволюцията на височината $h(t, x)$ по продължението (тангенциално) на вициналата.

От тези основополагащи за областта трудове до днес, групиране е наблюдавано освен върху Si(111) и при W(110)^{3, 4}, Al₂O₃(0001)^{4, 5}, MgAl₂O₄(100)⁵ и са разработени множество нови модели – аналитични и изчислителни. Уравнението на ST поради значителната си математическа сложност – нелинейно ЧДУ от четвърти ред, моделиращо нестабилна система остава неизследвано в множество свои аспекти, особено по отношение на получаването на аналитични решения за експлицитната статика и динамика на групите.

Настоящият доклад ще бъде фокусиран върху съвременен поглед върху добре известни резултати – скейлинговите отношения на величини характеризиращи групите, заедно с нови такива – получаване на приближени динамични решения от тип „бягаща вълна“. Заедно с това, ще бъде представен значителния контраст между статичния и динамичния режим напр. в симетрията на групата и факторите определящи нейните основни скали.

Цитати:

1. Latyshev, A., Aseev, A., Krasilnikov, A., Stenin, S., 1989. Transformations on clean si(111) stepped surface during sublimation. Surface Science 213, 157–169.
2. 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
3. Toktarbaiuly, O., et.al., 2018. Step bunching with both directions of the current: Vicinal w(110) surfaces versus atomistic-scale model. Physical Review B 97.
4. Usov, V., et.al., 2020. Revealing electromigration on dielectrics and metals through the step-bunching instability. Physical Review B 102.
5. Toktarbaiuly, O., 2021. Step bunching on mgal2o4(100). Unpublished Results.

ПОЛУЧАВАНЕ, ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ И МОЛЕКУЛНО МОДЕЛИРАНЕ НА ЛИПИДНИ ЛЕКАРСТВО-ДОСТАВЯЩИ СИСТЕМИ

Валентина Милева, Стефания Гайдарова, Галя Маджарова, Христо Цачев

*Софийски университет „Свети Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
София 1164, бул. Джеймс Баучър 1
valetto333@gmail.com, ohstsg@chem.uni-sofia.bg*

Настоящото изследване е насочено към разработване и охарактеризиране на новосинтезирани твърди липидни наночастици като иновативен носител за вътреклетъчно доставяне на активни лекарствени вещества. Синтезирани са серии от проби на наночастици^{1,2}, предназначени да енкапсулират лекарствени вещества като химиотерапевтици, антиинфекциозни и антихистаминови вещества, деконгестанти и други. Частиците са получени чрез метода на фазовата инверсия (PIT), при който специфичните температурни свойства на повърхностно-активните вещества водят до образуване на стабилни наноструктури с тясно разпределение по размер. Проведени са DLS и TEM анализи, като резултатите показват среден размер на частиците между 30 и 100 nm, нисък индекс на полидисперсност и стабилен Z-потенциал. Морфологичното охарактеризиране потвърждава образуването на еднородни сферични и елипсовидни наночастици.

Изградени бяха и многокомпонентни молекулни модели, основаващи се на структурната и термодинамична характеристика на компонентите, които изграждат частиците, с цел предвиждане на вътрешната организация на липидната матрица и взаимодействията ѝ с енкапсулираните лекарствени вещества. Компютърните модели на частиците се използват за проследяване на стабилността на системата при различни концентрации на енкапсулираните вещества, при различни условия на средата, както и за очертаване на потенциалните механизми за освобождаване на лекарствените молекули от частиците.

Получените липидни наночастици притежават характеристиките на ефективна система за доставяне на лекарствени вещества в клетките, те са биосъвместими, биоразградими и притежават потенциал да редуцират значително нежеланите лекарствени реакции, съпътстващи терапията с конвенционални продукти.

1. C. Tzachev, Solid lipid nanoparticle for intracellular release of active substances and method for production the same, WO2019116062
2. C. Tzachev, Mucoadhesive dispersion nanoparticle system and method for production the same, WO2020053609

Благодарности: Част от изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на проект към НИС№ КП-06-ДО02/2-08.07.2021 г.

СЕКЦИЯ ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ

Лора Велинова, ФХФ – СУ

Вероника Петкова, ФХФ – СУ

Стоян Граматиков, ФХФ – СУ

Поля Колева, ФХФ – СУ

ТЕОРЕТИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА ВКЛЮЧВАНЕТО НА КАНАБИДИОЛ В БЕТА-ЦИКЛОДЕКСТРИН

Лора Велинова¹, Николета Кирчева², Валя Николова¹, Силвия Ангелова², Тодор Дудев¹

- 1 Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, София 1164, [e-mail: lora.svetoslavova02@gmail.com](mailto:lora.svetoslavova02@gmail.com); ohtvd@chem.uni-sofia.bg; ohttd@chem.uni-sofia.bg
- 2 Институт по оптически материали и технологии „Акад. Й. Малиновски“, Българска академия на науките, София 1113, [e-mail: nkircheva@iomt.bas.bg](mailto:nkircheva@iomt.bas.bg); sea@iomt.bas.bg

През последните години канабиноидите все по-често се прилагат в борбата с раковите заболявания. Освен че облекчават болката, те подпомагат стимулирането на апетита и контролират гаденето, чест страничен ефект на химиотерапевтиците. Особено важно тяхно качество е способността им да подпомагат протичането на автофагия, която да доведе до програмирана смърт на раковите клетки, както и способността да възпрепятстват развитието на метастази. При включването на канабиноиди (молекули-гости) в циклодекстрини (молекули-домакини) се подобряват редица техни свойства.^{1,2} Водоразтворимостта на комплексите се увеличава в сравнение с тази на свободните канабиноиди, също така освобождаването им в организма е по-контролирано, а бионаличността - подобрена. Комплексите на включване могат да осигурят селективно доставяне на канабиноидите до раковите клетки с минимални странични ефекти. Настоящото изследване е проведено с методите на изчислителната химия, при използване на инструментариума на Теория на функционала на плътността. Изследвани са различни геометрии и стехиометрии на комплексите на включване на канабидиол в β -циклодекстрин с цел разкриване на термодинамичните характеристики на процеса. Получените резултати са сравнени с налични в литературата експериментални и теоретични данни и разкриват важни аспекти на процеса на включване на канабиноиди (молекули-гости) в циклодекстрини (молекули-домакини).

Цитати:

- 1 K. Hatziaapiou *et al.*, “Biophysical Studies and In Vitro Effects of Tumor Cell Lines of Cannabidiol and Its Cyclodextrin Inclusion Complexes,” *Pharmaceutics*, vol. 14, no. 4, p. 706, Apr. 2022, doi: 10.3390/PHARMACEUTICS14040706/S1
- 2 L. Chen, W. Yang, C. Gao, X. Liao, J. Yang, and B. Yang, “The complexes of cannabidiol mediated by bridged cyclodextrins dimers with high solubilization, in vitro antioxidant activity and cytotoxicity,” *J. Mol. Liq.*, vol. 345, p. 117017, Jan. 2022, doi: 10.1016/J.MOLLIQ.2021.117017.

СТРУКТУРНО-ЕЛЕКТРОХИМИЧЕН АНАЛИЗ НА ТВЪРД ВЪГЛЕРОД КАТО АНОДЕН МАТЕРИАЛ ЗА НАТРИЕВО-ЙОННИ БАТЕРИИ

Вероника Петкова¹, Христо Рашеев¹, Аля Таджер¹, Marie Doublet²

- 1 *Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра Физикохимия, Лаборатория по квантова и изчислителна химия, бул. „Дж. Баучър“ 1, 1164 София, veronikapetkova00@gmail.com*
- 2 *CNRS, Univ Montpellier, ICGM, Department Chimie Physique Théorique and Modélisation, Bât 17 CC1700, Place Eugène Bataillon 34095 Montpellier cedex 5 France*

Прогресът към устойчиви енергийни технологии изисква разработване на достъпни и ефективни устройства за съхранение на енергия. Макар литиево-йонните батерии да заемат водещо място на пазара, дефицитът на литий и растящите му цени засилват интереса към алтернативи. Натриево-йонните батерии (SIBs) представляват примамлива перспектива поради равномерното разпространение и ниската цена на натрия. Основно предизвикателство пред развитието на SIBs е откриването на подходящи анодни материали, тъй като графитът демонстрира нисък капацитет спрямо натрий. Твърдият въглерод (hard carbon, HC) изпъква като обещаващ кандидат за аноден материал поради своята разнородна структура, наличие на нанопори и дефекти, които позволяват различни механизми за съхранение на натрий. Съвременни методи на синтез като плазмено отлагане позволяват контрол върху морфологията и дефектната структура на HC, като по този начин може да се подобрят електрохимичните характеристики.

Настоящото изследване разглежда взаимодействието на натрий с фрагменти от твърд въглерод (циркулени и нанопори), с цел по-добро разбиране на процесите при зареждане и разреждане на батерията. Чрез квантово-химични методи – DFT (Density Functional Theory) и DFTB (Density Functional Tight Binding) – са изчислени енергии на образуване, потенциал и капацитет на различни модели. Целта е да се определи при какви условия и защо натрият предпочита да агрегира в клъстери, вместо да взаимодейства с въглеродната подложка, и как това влияе на необратимия капацитет. Получените резултати допринасят за разбирането на връзката структура-електрохимични характеристики и могат да насочат бъдещите усилия за оптимизация на анодните материали при SIBs.

МОЛЕКУЛНО-ДИНАМИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА СТРУКТУРНА ДЕФОРМАЦИЯ НА ЗЕОЛИТ RHO ВЪВ ВОДНА СРЕДА

Стоян Граматиков, Петко Петков и Георги Вайсилов

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

Изследването на структурните промени на зеолитите при криогенни условия е от съществено значение за оптимизиране на тяхната работа при разделяне и съхранение на различни газове. В това изследване се разглеждат структурни деформации на наноразмерен RHO зеолит при хидратация и последващо охлаждане до ниски температури, чрез молекулно-динамични симулации. Експериментални изследвания показват¹, че при хидратация при 300 K структурата на наноразмерния RHO зеолит е съставена от две кристални фази, дължащи се на различни взаимодействия между водните молекули и извънрешетъчните катиони.

За да се оцени влиянието на количеството вода в кухините на RHO са направени 4 модела с различно водно съдържание. Всички структури на RHO решетката съдържат 5 Cs⁺ йона, а молекулите вода са разпределени между двете *lta* кухини. Началният параметър на елементарната клетка е 14.8 Å, а съставът на зеолитната решетка е заимстван от предишно наше изследване на същия зеолит.² Проведени са *ab initio* молекулно-динамични симулации при 4 различни температури.

Резултатите от теоретичното изследване показват ясна корелация между броят на водните молекули в кухините на решетката и големината на зеолитната клетка. Понижаването на температурата води до намаляване на размера на зеолита и елиптична деформация на двойните осемчленни пръстени (*d8r*). Структурните различия при изследваните модели се обясняват от различната координацията на кислородните атоми от водните молекули и извънрешетъчните Cs⁺ йони, както и от мобилността им при различните условия.

Цитати:

1. Clatworthy, E. B.; Paacklar, A. A.; Dib, E.; Debost, M.; Barrier, N.; Boullay, P.; Gilson, J.-P.; Nesterenko, N.; Mintova, S. Engineering RHO Nanozeolite: Controlling the Particle Morphology, Al and Cation Content, Stability, and Flexibility. *ACS Appl. Energy Mater.* 2022.
2. Clatworthy, E. B.; Moldovan, S.; Nakouri, K.; Gramatikov, S. P.; Dalena, F.; Daturi, M.; Petkov, P. St.; Vayssilov, G. N.; Mintova, S. Visualizing the Flexibility of RHO Nanozeolite: Experiment and Modeling. *J. Am. Chem. Soc.* 2023.

МОДЕЛИРАНЕ НА КОМПЛЕКСИ НА Rh КАТИОНИ В ЗЕОЛИТ ТИП ВЕА

Поля В. Колева, Искра З. Колева, Християн А. Александров

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

Зеолитите са естествени алумосиликатни минерали, известни от около 250 години. Техните структури представляват значителен интерес за хетерогенния катализ, като йонообменните им свойства са от ключово значение за каталитичната им активност. Редица процеси, като хидрокрекинг на тежки нефтени фракции или изомеризация на леки бензинови фракции се катализират от протонирана форма на зеолита, съдържаща H^+ катиони - Брьонстедови (Brønsted) киселинни центрове. Метал-съдържащите зеолитни катализатори намират широко приложение в процеси като селективна каталитична редукция на азотни оксиди, използвана за пречистване на отработени газове от дизелови двигатели [1]. Комплексите на родий с CO и NO също могат да катализират важни за индустрията реакции, като хидрогениране на алкени и алдехиди съответно до алкани и алкохоли, както и хидроформиране на алкени до алдехиди [2].

С помощта на периодични квантовохимични изчисления, проведени с програмен пакет VASP и обменно-корелационен функционал PBE, бяха моделирани структури на $[Rh]^{2+}$; $[Rh^+H_z]^{2+}$; $[Rh^{3+}H]^{2+}$; $[Rh^{3+}O^{2-}]^+/H_z^+$; $[Rh^{3+}(OH)]^{2+}$; $[Rh^{2+}(OH)]^+/H_z^+$ и $[Rh^{2+}(H_2O)]^{2+}$ катиони, разположени в порите на зеолит тип ВЕА. Разгледахме и техни моно- и ди- карбонилни и нитрозилни комплекси. Анализирахме как наличието на тези лиганди влияе върху стабилността на родиевите катиони. Изчислихме и C-O и N-O вибрационните честоти, както и енергиите на свързване на лигандите. Определен бе и реда на стабилност, както за структурите с родиеви катиони, така и на техните карбонилни и нитрозилни комплекси чрез реакции на превръщане.

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.

Цитати:

1. J. Weitkamp Solid State Ionics 131 (2000) 175 – 188.
2. K. Khivantsev, A. Vityuk, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, D. Blom, O. Alexeev, M. Amiridis, ACS Catal. (2017), 7, 9, 5965–5982.

СЕКЦИЯ ХИМИЧНИ И ФАРМАЦЕВТИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ

Никол Стоева, ФХФ – СУ

Татяна Славова, ФХФ – СУ

Маноела Алексиева, ФХФ – СУ

Димитрина Фотева, ФХФ – СУ

Йордан Съйков, ФХФ – СУ

Стилиян Колев, ФХФ – СУ

Христина Мирчева, ФХФ – СУ

Росена Крушовалиева, ФХФ – СУ

Илиан Димитров, ФХФ – СУ

Даниел Аргилашки, МУ – Пловдив

СПОНТАННО ОБРАЗУВАНЕ НА НЕСФЕРИЧНИ ЧАСТИЦИ ЧРЕЗ ФАЗОВО РАЗДЕЛЯНЕ НА ЛИПИДИ ПРИ ЗАМРЪЗВАНЕ

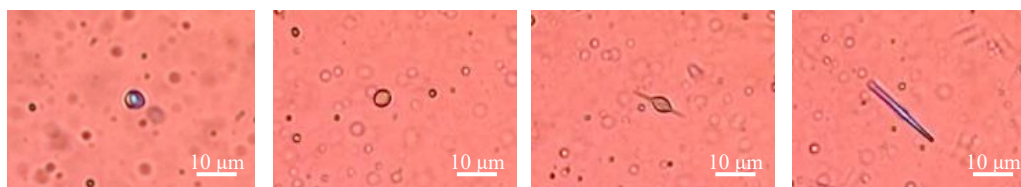
Никол Стоева, Жулиета Вълкова, Диана Чолакова

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

Малките капки в природата най-често заемат сферична форма поради принципа за минимизиране на енергия. В литературата са показани няколко метода за получаването на несферични течни и замръзнали частици от първоначално сферични емулсионни капки. Тези методи, обаче, се контролират от свойствата на повърхностно-активното вещество [1,2] или от геометрията на микроканалите, в които се получават частиците [3].

Целта на настоящето изследване е да получим несферични частици, използвайки единствено фазовото поведение на липидите в капката.

Експериментите показаха, че образуването на несферични частици е възможно, когато се наблюдава фазово разделяне между компонентите, включени в сместа. Това е постижимо при избор на подходящ температурен протокол, например охлаждане, последвано от частично стапяне на по-късоверижното масло в сместа и стъпково охлаждане, така че да се позволи едномерен кристален растеж в капката, виж фигурата. Изследванията с различни повърхностно-активни вещества показаха, че новооткритият метод не се повлиява от техния вид и концентрация. Влиянието на ефекта на състава на сместа, приложения температурен протокол, както и първоначалния размер на капките, които се деформират, също бяха изследвани подробно и ще бъдат коментирани в настоящата презентация.



- [1] D.Cholakova, A. Biserova, S. Tcholakova, N. Denkov, Self-shaping of triglyceride and alkane drops: Similarities and differences, *Colloids Surf., A* 692 (2024) 134037.
- [2] M. Giso, H. Zhao, P. T. Spicer, T. Atherton, A phase diagram of morphologies for anisotropic particles sculpted from emulsions, *J. Colloid Interface Sci.* 605 (2022) 138-145.
- [3] M. Caggionia, D. Trainib, P. M. Youngb, P. T. Spicer, Microfluidic production of endoskeleton droplets with controlled size and shape, *Powder Technol.* 329 (2018) 129-136.

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

ЕФИКАСНОСТ И МЕХАНИЗМИ НА ОТДЕЛЯНЕ НА МАСЛЕНИ ЗАМЪРСЯВАНИЯ ОТ ИЗКУСТВЕНА КОЖА

Татяна Славова, Кръстанка Маринова, Румяна Станимирова, Красимир Данов

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

Проведохме системно експериментално изследване на механизмите на почистване на изкуствена кожа (Vitroskin®) с разтвори на повърхностно-активни вещества (ПАВ), които са широко използвани в козметиката: динатриев лаурет сулфосукцинат (DSLSS), натриев лаурет сулфат (SLES), натриев додецил сулфат (SDS), додецил триметил амониев бромид (DTAB), и коко глюкозид (CG). Системното охарактеризиране на отделянето на маслени замърсявания, себум и полидиметилсилоксан (диметикон), от изкуствена кожа показва наличието на два основни механизма: емулгиране и изменение на трифазния контактен ъгъл (roll-up). Механизмът на емулгиране се наблюдава при системи с много ниско междуфазово напрежение, например себум в разтвори на SLES. При roll-up механизма от определящо значение е междуфазовата активност на ПАВ и адсорбцията на ПАВ на твърдата повърхност. Затова, съществена адсорбция на DTAB на повърхността на кожата води до отделянето на диметикон при сравнително високи стойности на междуфазовото напрежение, 11 mN/m. Анионните и нейонните ПАВ по-слабо се адсорбират на повърхността на изкуствената кожа, в резултат на което за отделянето на капки диметикон е нужно междуфазово напрежение под 5 mN/m. При нейонното ПАВ, CG, отделянето на диметикон се осъществява при по-ниски концентрации, в сравнение с йонните ПАВ. Комбинирането на CG с йонни ПАВ води до подобряване на почистването при по-ниски концентрации. С разработения *in vitro* метод са изследвани и почистващите свойства на смеси от ПАВ моделиращи опростени стандартни почистващи формулировки. Получените резултати за формулировките отлично съответстват на свойствата на изследваните смеси от ПАВ и тяхната междуфазова активност.

Цитати:

1. T. Slavova, R. Stanimirova, K. Marinova, K. Danov, *Molecules.*, 2025, vol. 30, 1813

Благодарности: Авторите благодарим за подкрепата на Европейския фонд за регионално развитие в рамките на ОП „Научни изследвания, иновации и дигитализация за интелигентна трансформация“ 2021-2027г., проекти BG16RFPR002-1.014-0005 и BG16RFPR002-1.014-0001 и на проект КП-06-Н 79/4/23 на ФНИ-МОН, България.

ОПТИМИЗИРАНЕ НА ФОРМУЛИРОВКА ЗА ШАМПОАН, СЪДЪРЖАЩА МЕТИЛ ЕСТЕР СУЛФОНАТИ ПО ОТНОШЕНИЕ НА ВИСКОЗИТЕТ И МЪТНОСТ

Маноела Алексиева, Гургана Радулора, Красимир Данов

*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*

В литературата [1] е проведено системно изследване на реологичното поведение на смеси на метил естер сулфонати (MES) и кокамидопропил бетаин (CAPB) в присъствие и отсъствие на добавки (мастни алкохоли, коко моно етанол амид и NaCl) и различни отношения между двете повърхностно-активни вещества (ПАВ). Получените резултати, показват че реологията на формулировки с MES е аналогична на тази за формулировки, в които MES е заменен с натриев додецил сулфат. Това позволява използването на биоразградимите MES за получаване на козметични продукти и продукти за дома.

Настоящото изследване е фокусирано върху изследване на реологичния отговор на две отношения (5:1 и 6:1) между анионно ПАВ (MES) и цвистерйонно ПАВ (CAPB) в присъствие на неорганични соли (NaCl, MgCl₂ и CaCl₂). Използваните анионни ПАВ са два вида MES с различен състав (отношенията на MES с 16 или 18 въглеродни атома в опашката са 60:40 и 80:20) и натриев лаурил естер сулфат с две етоксигрупи (SLES-2EO). Сравнението на солевите криви показва, че смесите на MES и CAPB имат много по-висок вискозитет от смесите на SLES-2EO и CAPB, независимо от използваната неорганична сол.

От друга страна смесите на MES, CAPB и сол (NaCl, MgCl₂ и CaCl₂) са мътни на стайна температура, докато ако в тези смеси частично MES се замени с SLES-2EO – те са бистри. За подобряване на мътноста са изследвани и тройни смеси (MES, SLES-2EO и CAPB), които са бистри и има вискозитети по-високи от тези на двойните смеси от SLES-2EO и CAPB.

Цитати:

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

ЕФЕКТ НА ЦИНКОВИ КАТИОНИ ВЪРХУ БИОЦИДНИТЕ СВОЙСТВА НА СМЕСИ ОТ АНИОННИ И ЦВИТЕРЙОННИ ПОВЪРХНОСТНО-АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА

Димитрина Фотева^{1,2}, Светослав Е. Аначков¹, Славка Чолакова¹

- 1 СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, София 1164, бул. Джеймс Баучър 1, df@lcpe.uni-sofia.bg
- 2 Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“ (БИОРЕСУРСИ БГ), София, България

През 2019 г. около 24% от смъртните случаи в човешката популация са свързани с инфекциозни заболявания, причинени от микроорганизми. Приблизително 2% от тях се дължат на инфекции, причинени от *Staphylococcus aureus* [1]. Разработени са множество антибактериални агенти за борба с патогените, като антибиотици, дезинфектанти и антисептици. Въпреки това, поради появата на нови резистентни щамове, превенцията на инфекциите е от изключително значение.

Синтетичните детергенти (синдети) се използват често в почистващи формулировки и за да бъдат използвани като ефективни биоциди, трябва да са способни да унищожат повечето бактерии за кратко време, без да дразнят кожата. В нашето изследване проучихме антибактериалната активност на цинкови катиони (Zn^{2+}), анионен и цвитерйонен синдети и техни смеси срещу *S. aureus*. Определихме минималната инхибиторна концентрация (МИК) на изследваните биоциди и техните смеси чрез метода на дифузия в агар и сравнихме получените МИК с критичните концентрации на мицелообразуване. Освен това, използвайки модификация на метода на колонообразуващите единици, установихме, че комбинацията от анионно ПАВ, цвитерйонно ПАВ и Zn^{2+} показва синергична биоцидна активност при кратко време на контакт (до 3 минути). Този синергизъм зависи от съотношението на анионно към цвитерйонно ПАВ, като е най-ясно изразен при излишък на анионно ПАВ.

Благодарност: Работата е финансирана от Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“ (БИОРЕСУРСИ БГ), проект BG16RFPR002-1.014-0001, финансиран от ОП „Научни изследвания, иновации и дигитализация за интелигентна трансформация“

1. GBD 2019 Antimicrobial Resistance Collaborators. Global mortality associated with 33 bacterial pathogens in 2019: a systematic analysis for the Global Burden of Disease Study 2019. *Lancet*. 2022 Dec 17; 400(10369):2221-2248.

ЕФЕКТ НА СЪСТАВА НА ИЗКУСТВЕНИТЕ ЧРЕВНИ ТЕЧНОСТИ ВЪРХУ РАЗТВАРЯНЕТО НА АМОРФНИ ТВЪРДИ ДИСПЕРСИИ

Йордан Съйков¹, Христина Мирчева¹, Нико Холмсток², Сумит Арора², Ян Бевернаж²,
Кристоф Тистерт², Захари Винаров¹

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

2 *Pharmaceutical Sciences, Janssen Pharmaceutica NV, Beerse, Belgium*

Много нови лекарствени вещества имат ниска водоразтворимост, което ограничава тяхната орална бионаличност. Един от ефективните подходи за преодоляване на този проблем е създаването на аморфни твърди дисперсии с подходящ полимер. Въпреки че тези формулировки подобряват бионаличността спрямо кристалните форми, предвиждането на поведението им *in vivo* е затруднено поради сложния им профил на разтваряне, включващ пресищане, фазово разделяне и утаяване.

Настоящото проучване изследва влиянието на състава на изкуствените чревни течности върху разтварянето на аморфни дисперсии. Те са получени чрез разпръсквателно сушене на слаборастворимо лекарство с HPMCAS-LG (в съотношение 1:3). Използвани са четири симулирани чревни среди (на гладно) – с фосфатен или бикарбонатен буфер и с екстракт от свинска жлъчка или смес от таурохолат и лецитин (FaSSIF). Концентрациите на лекарството и полимера след филтриране или центрофугиране са измерени чрез течна хроматография, а наноагрегатите – чрез лазерно светоразсейване.

Най-високи лекарствени концентрации след филтриране се наблюдават в средата със свинска жлъчка във фосфатен буфер, следвана от FaSSIF във фосфатен и жлъчка в бикарбонатен буфер. Най-ниски концентрации са измерени при FaSSIF в бикарбонатен буфер. Полимерът се разтваря напълно във всички среди, но по-бавно в бикарбонатните. След ултрацентрофугиране лекарствените концентрации значително намаляват и се изравняват, докато полимерът остава в сходни концентрации, независимо от метода на обработка.

В заключение, съставът на изкуствените чревни течности силно влияе върху разтварянето на аморфните дисперсии и образуването на наноагрегати, което зависи както от източника на жлъчни соли, така и от използвания буфер.

ВЛИЯНИЕ НА ПОЛИМЕРИ ВЪРХУ КРИСТАЛИЗАЦИЯТА НА АМОРФЕН ГЛИБЕНКЛАМИД В ЧРЕВНА СРЕДА

Стилиян Колев, Владимир Петков, Захари Винаров

*Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство,
бул. Джеймс Баучер № 1, 1164 София, България
sk@lcpe.uni-sofia.bg*

Много от съвременните активни вещества имат ниска разтворимост във вода, която води до ниска орална бионаличност. Един от основните подходи за подобряване на разтварянето и бионаличността на такива вещества е аморфизирането им. При разтваряне, тези аморфни форми образуват преситени разтвори, стабилизирани с помощта на полимери. В настоящата работа изследвахме как видът на използвания полимер влияе на кристализацията на глибенкламид от преситени разтвори в присъствие и отсъствие на чревни течности.

За целта бяха изследвани 21 полимера при концентрация от 3 мг/мл, а като среда за разтваряне беше използван фосфатен буфер (pH = 6.5) или чревна среда, съдържаща жлъчни соли и фосфолипиди при същото pH. Аморфизиран глибенкламид беше добавян към средата за разтваряне и концентрацията на лекарството в образуваните преситени разтвори беше измервана за 120 мин чрез течна хроматография, а кристализацията беше изследвана чрез микроскопски наблюдения в поляризирана светлина.

Във фосфатен буфер, повечето изследвани полимери успешно инхибираха кристализацията на преситения разтвор на глибенкламид като най-високи концентрации бяха измерени с Eudragit EPO. В чревна среда, стабилността на преситените разтвори беше значително по-ниска и при почти всички полимери беше наблюдавана бърза кристализация и утаяване на глибенкламид. Изключение прави HPMCAS-HG, при който преситеният разтвор на глибенкламид беше стабилен за 120 мин в чревни течности. Ниската стабилност на преситените разтвори в чревна среда се дължи на фосфолипидите, за които е известно че могат да предизвикат кристализация, докато стабилността в разтвори на HPMCAS-HG вероятно се дължи на хидрофобните свойства на полимера и по-сложното му фазово поведение.

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".

ГАСТРОИНТЕСТИНАЛНА ФИЗИОЛОГИЯ И ФАРМАКОКИНЕТИЧНИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ХРАНА И ЛЕКАРСТВА

Христина Мирчева, Мария Миткова, Захари Винаров

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

Взаимодействието между перорално прилагани лекарствени продукти и храна е ключов фактор при разработването на нови терапии и оптимизацията на съществуващи вече такива. Храната може значително да повлияе фармакокинетичния профил на лекарствата чрез промени в стомашното рН, вискозитета, обема на стомашното съдържимо и моториката на гатсроинтестиналния тракт.

Проучванията на Koziolk et al. (2019) показват, че освен физикохимичните промени, храната влияе и върху активността на метаболизиращи ензими, мембранни транспортери и други. Регулаторните насоки на FDA (2022) и EMA (2012) препоръчват използването на стандартизирани режими на хранене за оценка на ефекти от храната, като FDA конкретно предвижда две режима-висококалоричен и умерен, за симулиране на различни физиологични условия и идентифициране на най-екстремни взаимодействия. В същото време обаче, използваните стандартизирани диети не отразяват реалното разнообразие на храната, нито географски и етнически особености в храненето. Поради тази причина, настоящата работа има за цел създаването на база данни за свойствата на храните (калорийна стойност, макронутриенти, физикохимични свойства), като включва и информация за известни клинични ефекти върху оралната бионаличност и техните механизми. Така обобщената информация ще подобри изследването и разбирането на взаимодействията храна-лекарство.

Литература:

1. Koziolk, M., et al. (2019). *The mechanisms of pharmacokinetic food-drug interactions – A perspective from the UNGAP group*. European Journal of Pharmaceutical Sciences. [//doi.org/10.1016/j.ejps.2019.04.003](https://doi.org/10.1016/j.ejps.2019.04.003)
2. EMA (2012). *Guideline on the investigation of drug interactions*
3. FDA (2022). *Assessing the Effects of Food on Drugs in INDs and NDAs — Clinical Pharmacology Considerations*. U.S. Food and Drug Administration

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".

ЛИПОЗОМИТЕ: ИНТЕЛИГЕНТНИ СИСТЕМИ ЗА НАТОВАРВАНЕ И ОСВОБОЖДАВАНЕ НА ТЕРАПЕВТИЧНИ АГЕНТИ

Росена Росенова Крушовалиева, Христо Цачев Цачев

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
rosenakrushovalieva@gmail.com, hristo.tzatchev@gmail.com*

Липозомите представляват наноструктурни носители с уникални физико-химични свойства, които ги правят изключително подходящи за прилагане и използване в таргетираното доставяне на лекарства. Съставени са от липидни двуслойни мембрани, те осигуряват защитата на активни вещества и позволяват тяхното контролирано освобождаване в специфични области на организма. Разглеждат се основни характеристики на липозомите, структурата им и механизмът им на действие. Основен метод за приготвяне на липозоми е хидратирането на тънък липиден филм. Благодарение на своята структура позволяват натоварване на терапевтични агенти с хидрофилна и с липофилна природа. Липозомите дават значителни предимства в терапията, като намаляват страничните ефекти и увеличават ефективността на лечението. Възможностите, които дават за целенасочена и безопасна терапия отбелязват големият им потенциал в съвременната технология на лекарствените форми.

Цитати:

1. José Javier López-Cano et.al – Liposomes as vehicles for topical ophthalmic drug delivery and ocular surface protection – Expert Opinion on drug delivery, 2021, 79:1-23
2. Maria-Lucia Briuglia & Chiara Rotella & Amber McFarlane & Dimitrios A. Lamprou - Influence of cholesterol on liposome stability and on in vitro drug release, Drug Deliv. And Transl. Res., 2015, 1:1-11
3. Michael Anderson and Abdelwahab Omri - The Effect of Different Lipid Components on the In Vitro Stability and Release Kinetics of Liposome Formulations, Drug Delivery, 2004 39:11-33
4. Masahiro Yamauchi,* Kyoko Tsutsumi, Masayuki Abe, Yoichi Uosaki, Masashi Nakakura, and Noboru Aoki - Release of drugs from liposomes varies with particle Size, - Biol. Pharm. Bull., 2007, 35: 963-966
5. Xiang-Chun Gao¹, Hui-Ping Qi, Jian-Hai Bai, Lei Huang and Hao Cui - Effects of oleic acid on the corneal permeability of compounds and evaluation of its ocular irritation of rabbit eyes, Current eye research, early online, 2014, 1–8 I. Georgiev, *Inorg. Chem.*, 2020, vol. 15, 245-250

ПОЛУЧАВАНЕ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА КОКРИСТАЛИ НА БАЗАТА НА НЕСТЕРОИДНИ ПРОТИВОВЪЗПАЛИТЕЛНИ ЛЕКАРСТВА И ОРГАНИЧНИ КИСЕЛИНИ

Илиан И. Димитров, Веселина Т. Рангелова, Тони Г. Спасов

*Софийски университет "Св. Климент Охридски", Факултет по химия и фармация,
Катедра Приложна неорганична химия, бул. „Дж. Баучър“ 1, 1162 София,
ilian.dimitrow@abv.bg*

Едно от основните направления в съвременната фармацевтична индустрия и наука е разработването на технологично усъвършенствани лекарствени форми на добре познати активни вещества с цел подобряване на техните фармакологични свойства. Формулирането на кокристални структури е особено актуална тематика в контекста на непрестанното търсене на иновативен подход, който да реши проблемите, свързани с незадоволителните параметри на лекарствените молекули, като например разтворимост, проницаемост през физиологичните мембрани и бионаличност. Широкото поле на употреба на нестероидните противовъзпалителни лекарства (НСПВЛ), тяхната висока ефикасност и относително нисък риск от поява на нежелани лекарствени реакции водят до нуждата от подобряване на фармакокинетичните им характеристики – съществен акцент при технологичната разработка на нови лекарствени форми. Лекарства от групата на производните на арилпропановата киселина, т.нар. "профени", попадат в клас II по Биофармацевтичната класификационна система, т.е. това са вещества с висока пермеабилност, но ниска водоразтворимост. Кристалното инженерство, и по-конкретно синтеза на кокристални структури, предоставя потенциално решение на този проблем, тъй като могат да бъдат разработени модерни лекарствени форми с оптимални биофармацевтични параметри, като същевременно не се променя химическата структура на активното вещество. Кокристализацията с органични поликарбоксилни и полихидроксилни киселини е доказано работеща стратегия предвид възможността за образуване на голям брой водородни връзки с молекулите на активните вещества, което да стабилизира новосъздадената микроструктура. Оптимизираните свойства на лекарствените форми носят множество ползи, включително фармакоикономически и здравни поради намаляването на администрираните дози в хода на лечението и увеличаване неговата ефикасност.

Благодарности: This work was supported by Project BG16RFPR002-1.014-0006 "National Centre of Excellence Mechatronics and Clean Technologies", co-funded by the European Union, under "Research Innovation and Digitization for Smart Transformation" program 2021-2027.

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND DFT STUDY OF CHITOSANE-FRUCTOSE DERIVATIVE

Daniel Argilashki^{1,2}, Nikolay Toshev³, Yordanka Uzunova³, Todor Dudev⁴

- 1 Medical University-Plovdiv, Medical College, Specialty “Assistant pharmacist”, 120 Bratya Bukston str, Plovdiv-4004, Bulgaria, daniel.argilashki@mu-plovdiv.bg
- 2 Medical University-Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Technology and Biopharmacy, 15A Vassil Aprilov blvd, Plovdiv-4002, Bulgaria
- 3 Medical University-Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov blvd, Plovdiv-4002, Bulgaria, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg, yordanka.uzunova@mu-plovdiv.bg
- 4 Sofia University “St. Kliment Ohridski”, Faculty of Chemistry and Pharmacy, Department of Pharmaceutical and Applied Organic Chemistry, 1 James Bourchier Blvd., Sofia, Bulgaria, t.dudev@chem.uni-sofia.bg

Chitosan is a polysaccharide consisting of randomly distributed β -1 $\rightarrow$ 4 linked D-glucosamine and N-acetyl-D-glucosamine. This natural biopolymer finds extensive applications in diverse areas such as targeted drug delivery, antimicrobial activities, and antitumor systems (1). It has been proposed that chemical modifications of chitosan endow the polysaccharide with specific properties (2). There are several synthetic routes for chitosan's modification (3) whereas in our work we focused on the reaction between chitosan's amino group and the carbonyl group of monosaccharide followed by reduction. The chitosan derivative with fructose (CF) was synthesized, dialyzed, and freeze-dried. The IR spectroscopy proved the successful outcome of the chemical reaction. The solubility of the CF at different pH was examined. In addition, we have studied the derivative using density functional theory (DFT). We performed calculations at the B3LYP/6-31G(d) level of theory, combining it with polarizable continuum calculations (PCM). The computed IR spectra of the chitosan derivative were in good agreement with the experimental FTIR spectra. Additionally, we evaluated several key characteristics of the molecule studied, such as energy gap (ΔE), electron affinity (EA), hardness (η), ionization potential (IP), chemical potential (μ), electronegativity (χ), electrophilicity index (ω), softness (ζ), and maximum charge transfer index (ΔN_{max}).

Цитати:

1. Shrestha R, Thenissery A, Khupse R, Rajashekara G. *Molecules*. 2023; 28(22):7659
2. Sacco P, Cok M, Scognamiglio F, Pizzolitto C, Vecchies F, et al. *Molecules*. 2020; 25(7):1534.
3. Cohen E, Poverenov E. *Chemistry*. 2022; 28(67):e202202156.

Acknowledgements: This work is supported by Plovdiv Medical University's project DPDP-05/2024 “Chemical modification of chitosan for application in drugdelivery systems”, The research that led to these results was carried out using the infrastructure purchased under the National Roadmap for RI, financially coordinated by the MES of the Republic of Bulgaria (grant No D01-325/01.12.2023).

СЕКЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧНА ХИМИЯ

Валентин Петров, МУ – Плевен

Валентин Карачобанов, МУ – София

Стефан Костов, МУ – София

Виктория Георгиева, МУ – Плевен

Ренета Косева, МУ – Пловдив

Антония Мазникова, МУ – Пловдив

Кристиян Величков, МУ – Пловдив

Армина Абдулахи, МУ – Пловдив

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

Валентин Петров¹, Александрина Пешева¹, Александър Пъшев¹, Теодора Александрова¹, Лидия Петрова², Калина Илиева², Милена Атанасова², Галя Ставрева¹, Георги Алтънков², Диана Чешмеджиева³

- 1 Факултет „Фармация“, Медицински университет-Плевен, ул. „Св. Климент Охридски“ 1, 5800, Плевен, България, 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 разработен в предишни изследвания на колектива и е базиран на реакцията между енолизиращи се анхидриди и 3,4-дихидроизохинолинови производни.

Инхибиторната активност на синтезираните вещества спрямо човешки DPP-IV е измерена използвайки Ситаглиптин като контролна субстанция. Изследваните съединения показват инхибиторна активност в микромолярния диапазон, като при най-активното от серията е измерено IC₅₀ от 0,35 μM.

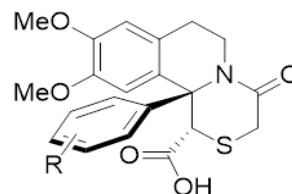
Цитотоксичността на всички съединения е тествана върху човешки мезенхимни стволови клетки. Доказано е, че всички съединения не са цитотоксични в изследваните концентрации.

Посредством теоретични подходи е оценена енергията на свързване между изследваните съединения и активния център на ензима, както и очакваните взаимодействия между тях.

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

Цитати:

1. Pashev, A.; Petrov, V.; Pesheva, A.; Petrova, L.; Ilieva, K.; Stavreva, G.; Atanasova, M.; Cheshmedzhieva, D.; Altankov, G.; Aleksandrova, T. Angular-Substituted [1,4]Thiazino[3,4-a]Isoquinolines: Biological Evaluation and In Silico Studies on DPP-IV Inhibition. *Int J Mol Sci* **2024**, 25, 11753, doi:10.3390/ijms252111753.



Фиг. 1: Обща формула на изследваните DPP-IVIs.

СИНТЕЗ, МОНОАМИНООКСИДАЗНА И АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНОСТ НА НОВИ ПИРОЛ-БАЗИРАНИ СЪЕДИНЕНИЯ

Валентин Карачобанов, Мая Георгиева, Емилио Матеев

Катедра “Фармацевтична химия”, Фармацевтичен факултет, МУ-София

Пироловите производни представляват химични структури с разнообразен и широк фармакологичен профил, което ги прави привлекателни за изследвания във фармацевтичната химия. Поради това бяха синтезирани две нови, неописани в литературата пирол-базирани съединения, като синтезът им бе осъществен чрез прилагане на Paal-Knorr кондензация. Кондензацията бе извършена в среда от ледена оцетна киселина, като реакционните времена бяха регистрирани. Структурите на новите съединения бяха охарактеризирани чрез прилагане на инфрачервена спектроскопия (ИЧ), протонен ЯМР (¹H-ЯМР), масспектрометрия (MS/LC). Последва определяне на радикал-улавящия капацитет на новите съединения чрез прилагане на DPPH и ABTS тестове. Едно от новите съединения бе идентифицирано като добър MAO-B инхибитор с добри антиоксидантни ефекти. Предстоящи изследвания ще бъдат фокусирани върху разширяване на новополучената серия от пирол-базирани съединения.

Благодарности: Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ (ФНИ) към Министерството на образованието и науката на Република България, договор № КП-06-M83/3; 03.12.2024.

МОЛЕКУЛЕН ДОКИНГ НА ПИРОЛ-БАЗИРАНИ СЪЕДИНЕНИЯ В АКТИВНИЯ ЦЕНТЪР НА АЦЕТИЛХОЛИНЕСТЕРАЗНИЯ ЕНЗИМ

Стефан Костов, Мая Георгиева, Емилио Матеев

*МУ-София, Фармацевтичен факултет, Катедра “Фармацевтична химия”, ул. Дунав
№2, София 1000, dean@pharmfac.mu-sofia.bg*

Лекарственият дизайн е най-модерния подход за откриване на нови лекарства. Той използва иновациите в науката и технологиите, за да постигне основната си цел: откриване на ефективни, нетоксични, безопасни и добре поносими лекарства. Молекулярният докинг към момента се използва като стандартен изчислителен инструмент в дизайна на лекарства за оптимизиране на водещи съединения и във виртуални скринингови проучвания за намиране на нови биологично активни молекули. С оглед на горепосоченото, чрез прилагане на лицензиран софтуер за молекулен докинг (*Schrödinger - Glide*) бяха осъществени докинг симулации на десет пиролови производни в активния център на ацетилхолинестеразния ензим (AChE). По този начин бяха идентифицирани няколко нови пирол-базирани съединения образуващи стабилни комплекси в активния център на AChE. Бяха изследвани активните аминокиселини участващи в образуването на стабилизиращ лиганд-ензимен комплекс. Също така, *ADME* свойствата на новите съединения бяха определени чрез *in silico* симулации. В резултат бе установено, че съединенията притежават добри физикохимични свойства. Бъдещите изследвания ще бъдат насочени към синтез и изследване на AChE инхибиторната активност на най-добре оценените лиганди.

Благодарности: Това изследване е финансирано от Фонд „Научни изследвания“ (ФНИ) към Министерството на образованието и науката на Република България, договор № КП-06-M83/3; 03.12.2024.

ЗЛАТНИ НАНОЧАСТИЦИ: МИКРОБИОЛОГИЧЕН СИНТЕЗ С ТЕХНИ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЛЪЧЕТЕРАПИЯТА

**Виктория Георгиева¹, Филип Маринов^{1,2}, Иво Петров², Крум Стоилов², Цветослав Лажовски², Петър Темнишки³, Светла Петрова⁴, Силвия Симеонова⁵, Петър Георгиев⁵
Поля Мариновска⁶ и Константин Балашев⁵**

- 1 Медицински университет - Плевен, Медицинска физика и биофизика, ул. Кл. Охридски" № 1, Плевен 5800, България, e-mail: filip.marinov@mu-pleven.bg, victoriageorgieva181@gmail.com
- 2 МБАЛ "Сърце и мозък", Медицински физика, ул. "Тиер Кюри" № 2, Плевен 5800, България, i.petrov.pn@heartandbrain.bg, ts.lazhovski.pn@heartandbrain.bg, k.stoilov.pn@heartandbrain.bg
- 3 Медицински университет - Плевен, Биохимия, Кл. Охридски" № 1, Плевен 5800, България, petar.temnishki@mu-pleven.bg
- 4 Софийски университет, Биологически факултет, бул. "Драган Цанков" № 8, София 1164, България, spetrova@biofac.uni-sofia.bg
- 5 Софийски университет, Факултет по химия и фармация, бул. Джеймс Баучер № 1. София 1000, България, fhkb@chem.uni-sofia.bg
- 6 Медицински университет - Плевен, Микробиология и вирусология, Кл. Охридски" № 1, Плевен 5800, България, microgen@mu-pleven.bg

Златните наночастици (AuNPs) се считат за перспективни кандидати за радиосенсибилизация¹ поради тяхната висока биосъвместимост, способност за локално усилване на радиационния ефект в туморната тъкан, нисък системен клирънс и изразен ефект на повишена пермеабилност и задържане (EPR ефект), водещ до акумулиране в туморите. Допълнително, възможността за функционализация с прицелни молекули, както и гъвкавостта по отношение на размера и формата, увеличават тяхната ефективност като носители за прицелно транспортиране на значителен брой златни колоидни частици. Лесното проследяване на тези наночастици улеснява фармакокинетичните изследвания и оптимизацията на дозировката за постигане на оптимални резултати в биомедицинските приложения.

Поради тези причини, разработването на подходящи методи за синтез на златни наночастици и изясняването на механизмите, чрез които йонизиращата радиация влияе на тяхната структура, са основни задачи в съвременните нанотехнологии. В настоящата презентация ще бъдат разгледани някои от методите за синтез на златни наночастици, които са най-близки до медицинските и фармацевтичните науки, класически и нови такива, като например микробиологичните подходи за синтеза им.

Освен това ще бъде представен експериментален подход за изследване на влиянието на йонизираща радиация², генерирана от медицински линеен ускорител (LINAC), върху морфологията и физикохимичните свойства на златни наночастици, синтезирани по класическия метод на Тюркевич. Промените в наночастиците преди и след облъчване са анализирани посредством UV-Vis спектроскопия и атомно-силова микроскопия (AFM), като получените резултати демонстрират дозозависими изменения в оптичните и структурните характеристики на наночастиците.

Цитати:

1. Jeremic B, Aguerri AR, Filipovic N., *Clin Transl Oncol* 2013;15:593-601.
2. P. Marinov, et.al. *C. R. Acad. Bulg. Sci.*, vol. 78, no. 4, pp. 505–512, Apr. 2025.

STRUCTURAL DIVERSITY OF ZINC-BINDING GROUPS ACTING AS HISTONE DEACETYLASE INHIBITORS

Reneta Koseva¹, Nikolay Toshev², Diana Cheshmedzhieva³, Yordanka Uzunova², Antonia Maznikova¹, Todor Dudev³

- 1 Medical University- Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, renetakiseva@gmail.com, antoanet.mv@gmail.com
- 2 Medical University- Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd. Plovdiv, Bulgaria, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg, yordanka.uzunova@mu-plovdiv.bg
- 3 Sofia University "St. Kliment Ohridski", Faculty of Chemistry and Pharmacy, Department of Pharmaceutical and Applied Organic Chemistry, 1 James Bourchier Blvd., Sofia, Bulgaria, dvalentinova@gmail.com, t.dudev@chem.uni-sofia.bg

Histone deacetylase inhibitors have attracted significant attention for their therapeutic potential¹. The FDA's approval of SAHA, a hydroxamic acid derivative, in 2007 focused scientific efforts on the development of structurally diverse HDAC inhibitors. Researchers aimed to design inhibitors with different zinc-binding groups that can bind to the metal ion in the HDAC active site, demonstrating promising anticancer activity². The aim of the present study is to classify and arrange the wide variety of chemical compounds that could potentially act as zinc-binding groups in HDAC inhibitors, possessing promising anticancer activity. The analysis was based on a literature survey of articles published between 2000 and 2024. Searches were conducted using different keyword combinations across major databases, including Scopus, Web of Science, and PubMed. This study's findings systematically present (a) a summary of currently approved HDAC inhibitors and their structural diversity, (b) identification of novel zinc-binding groups and compounds acting as HDACi, and (c) discussion on how these insights could contribute to the discovery of new similar inhibitors and the optimization of the existing therapeutic agents as well. The obtained data is a solid basis for studying how structurally different HDACi bind to various HDAC isoforms and, thus, could assist in designing of next-generation, structurally different HDAC inhibitors with an improved therapeutic index.

Цитати:

1. Marks, P. A.; Rifkind, R. A.; Richon, V. M.; Breslow, R.; Miller, T.; Kelly, W. K. *Nature Reviews Cancer* **2001**, 1 (3), 194-202
2. Zhang, L.; Zhang, J.; Jiang, Q.; Zhang, L.; Song, W. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry* **2018**, 33 (1), 714-721.

Acknowledgments: This research is supported by the Bulgarian Ministry of Education and Science under the National Program „Young Scientists and Postdoctoral Students-2.”

BINDING MODE OF DIFFERENT ZINC-BINDING GROUPS TO HDAC8

Antonia Maznikova¹, Nikolay Toshev², Diana Cheshmedzhieva³, Yordanka Uzunova², Reneta Koseva¹, Todor Dudev³

- 1 Medical University- Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, renetakiseva@gmail.com, antoanet.mv@gmail.com
- 2 Medical University- Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg, yordanka.uzunova@mu-plovdiv.bg
- 3 Sofia University "St. Kliment Ohridski", Faculty of Chemistry and Pharmacy, Department of Pharmaceutical and Applied Organic Chemistry, 1 James Bourchier Blvd., Sofia, Bulgaria,, dvalentinova@gmail.com, t.dudev@chem.uni-sofia.bg

The inhibition of histone deacetylases (HDACs) has emerged as a viable therapeutic strategy for the treatment of cancer. Among different HDAC isoforms, HDAC8 is the most frequently overexpressed in different cancers. Currently, only a limited number of HDAC inhibitors have been approved for clinical application as anticancer agents. Romidepsin is classified as a cyclic tetrapeptide, and Chidamide is a benzamide, whereas SAHA, Panobinostat, and Belinostat represent the class of hydroxamic acids¹. The objective of this study was to systemize and classify the diversity of binding modes of different zinc-binding groups to the HDAC8 enzyme. A literature survey of scientific articles written between 2000 and 2024 served as the basis for this investigation. Various keyword combinations were used in our search of the Scopus, Web of Science, and PubMed databases. Our systematic analysis covers (a) binding modes of approved inhibitors to the HDAC8 enzyme, (b) binding modes of structurally different zinc-binding groups to the HDAC8 enzyme, and (c) structural determinants of enzyme binding together with significant interactions within the HDACi-HDAC8 complex. The study of the binding mode of various HDACi with the HDAC8 enzyme can serve as a starting point for the optimization of the binding affinity of the zinc-binding groups to the enzyme's active site, thus potentially facilitating the design of new drugs that have different potency, affinity, and isoform selectivity.

Цитати:

1. Fruhauf, A.; Meyer-Almes, F. *Molecules* **2021**, 26 (17).

Acknowledgments: This research is supported by the Bulgarian Ministry of Education and Science under the National Program „Young Scientists and Postdoctoral Students-2.”

CHIDAMIDE AS A PROSPECTIVE DRUG FOR CANCER TREATMENT: A DFT STUDY

Kristiyan Velichkov¹, Nikolay Toshev², Diana Cheshmedzhieva³, Yordanka Uzunova², Todor Dudev³

- 1 Medical University- Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, kristiyan.velichkov4@gmail.com
- 2 Medical University- Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria
- 3 Sofia University "St. Kliment Ohridski", Faculty of Chemistry and Pharmacy, Department of Pharmaceutical and Applied Organic Chemistry, 1 James Bourchier Blvd., Sofia, Bulgaria

Histone deacetylase inhibitors (HDACi) have demonstrated emerging potential in cancer therapeutics by inhibiting the activity of histone deacetylase enzymes (HDACs)¹. Chidamide is a benzamide that received regulatory approval in China in 2014 and in Japan in 2021 for the treatment of peripheral T-cell lymphoma^{2,3}. Chidamide, as a zinc-dependent inhibitor of histone deacetylases (HDACi), binds to the active site of the HDAC enzyme. This work addresses a few important questions regarding the physicochemical properties and metal affinity/selectivity of chidamide. First, what is the preferred geometry (E/Z) of chidamide? Second, how do the structural factors influence the affinity/selectivity of chidamide when binding to essential metal cations (Zn²⁺, Fe²⁺, and Mg²⁺)? Third, what is the preferred mode of binding of chidamide to these metal ions? The research employed density functional theory and polarizable continuum model computations to study the physicochemical properties of chidamide.

Цитати:

1. Chen, A. Y.; Adamek, R. N.; Dick, B. L.; Credille, C. V.; Morrison, C. N.; Cohen, S. M. *Chemical Reviews* **2019**, 119 (2), 1323-1455,
2. Parveen, R.; Harihar, D.; Chatterji, B. P. *Cancer* **2023**, 129 (21), 3372-3380. DOI: 10.1002/cncr.34974.
3. Xu, Y.; Zhang, P.; Liu, Y. *Drugs of Today* **2017**, 53 (3), 167-176..

Acknowledgments: The research that led to these results was carried out using the infrastructure purchased under the National Roadmap for RI, financially coordinated by the MES of the Republic of Bulgaria (grant No D01-325/01.12.2023), 2.This research is supported by the Bulgarian Ministry of Education and Science under the National Program „Young Scientists and Postdoctoral Students-2.”

PREDICTING ANTIOXIDANT, ANTIMICROBIAL AND ANTICANCER ACTIVITY OF ISATIN DERIVATIVES WITH DFT STUDIES

Armina Abdollahi¹, Nikolay Toshev², Diana Cheshmedzhieva³, Yordanka Uzunova², Kaloyan Mihalev⁴, Ivelin Iliev⁴, Svetlana Georgieva⁴, Todor Dudev³

- 1 Medical University- Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., 4002 Plovdiv, Bulgaria, arminaabdollahi7@gmail.com
- 2 Medical University- Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., 4002 Plovdiv, Bulgaria, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg, yordanka.uzunova@mu-plovdiv.bg
- 3 Sofia University "St. Kliment Ohridski", Faculty of Chemistry and Pharmacy, Department of Pharmaceutical and Applied Organic Chemistry, 1 James Bourchier Blvd., 1164 Sofia, Bulgaria, dvalentinova@gmail.com, t.dudev@chem.uni-sofia.bg
- 4 Medical University of Varna, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Chemistry, 84 Tsar Osvooboditel Blvd., 9000 Varna, Bulgaria, kaloyan.mihalev@mu-varna.bg, ivelin.iliev@mu-varna.bg, svetlana.georgieva@mu-varna.bg

The structural versatility and multifaceted nature of isatin and its derivatives have placed these compounds at the forefront of pharmaceutical research, driving extensive efforts toward the design and synthesis of new biologically active analogs. This study was focused on the relationship between DFT descriptors and antioxidant¹, antimicrobial², and anticancer activities³ of different isatin derivatives. An extensive literature survey spanning the years 2000 to 2024 was carried out using the Scopus, Web of Science, and PubMed databases, using a range of keyword combinations. We have systematically analyzed the relationship between the molecular properties of isatin derivatives and their antioxidant, antimicrobial, and anticancer activities using Density Functional Theory (DFT) descriptors. Our findings focus on three key areas: (a) molecular properties influencing bioactivities, (b) specific DFT descriptors most correlated with antioxidant, antimicrobial, and anticancer efficacy, and (c) the predictive framework provided by DFT descriptors for evaluating therapeutic potential. This work emphasizes the role of DFT descriptors in revealing the fundamental factors that govern the antioxidant, antimicrobial, and anticancer activities of isatin derivatives, establishing a robust foundation for the targeted design of more effective prospective molecules.

Цитати:

1. Muglu, H.; Çavus, M.; Bakir, T.; Yakan, H. *Journal of Molecular Structure* **2019**, 1196, 819-827
2. Brkic, D.; Bozic, A.; Marinkovic, A.; Milcic, M.; Prlainovic, N.; Assaleh, F.; Cvijetic, I.; Nikolic, J.; Drmanic, S. *Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **2018**, 196, 16-30.
3. Vine, K. L., Matesic, L., Locke, J. M. & Skropeta, D. (2013). In M. Prudhomme (Eds.), *Advances in Anticancer Agents in Medicinal Chemistry* (pp. 254-312). Sharjah, UAE: Bentham Science Publishers.

Acknowledgments: This work was supported by the Science Fund of the Medical University of Varna under Project No. 23009, titled "Design, Synthesis, and Study of Isatin Hybrid Molecules with Presumed Broad-Spectrum Antimicrobial Activity and Potential Application in Implantology", led by Prof. Svetlana Fotkova Georgieva, PhD.

XXIII НАЦИОНАЛНА КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИЯ ЗА СТУДЕНТИ И ДОКТОРАНТИ

14-16 май 2025 г. София

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

