

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

20-22 май 2026 г. София



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



XXIV Национална конференция по химия за студенти и докторанти 2026
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/>



XXIV 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 BG05SFPR001-3.004-0004-C01 (ИНТЕРДОК), по процедура „Подкрепа за развитие на проектна докторантура“, финансиран от Програма „Образование“ 2021-2027, съфинансирана от Европейския съюз.

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
гл. ас. Кристина Симеонова, СУ
д-р Стоян Граматиков, СУ
докторант Поля Колева, СУ
докторант Дона Саралиева, СУ
студент Анастасия Язова, СУ

XXIV Национална конференция по химия за студенти и докторанти

Програма

20 май 2026, 130 аудитория на ФХФ, СУ

8:30 9:00 **Регистрация**, пред 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

9:00 10:00 **Откриване, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ**

Лекция на prof. Klemen Bohinc,

Faculty of Health Sciences, University of Ljubljana, Slovenia

„Surface modification and bacterial adhesion“

Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Изчислителна химия“

10:20 10:40 Поля Колева, И. Колева, Х. Александров

„DFT моделиране на комплекси на Rh катиони в порите на BEA зеолит“

10:40 11:00 Анастасия Язова, М. Кейханиан, И. Колева, Х. Александров

„DFT моделиране на образуването/разкъсването на C–C връзка върху FCC преходни метали“

11:00 11:20 Иво Лозанов, В. Велчева, Ю. Романова, А. Угринов, Н. Бурджиев, Г. Генчева

„Структура и спектрални характеристики на Pt(II) комплекс, получен при редукция на taciplatin с биологични редуктори: комбинирано теоретично и експериментално изследване“

11:20 11:40 Чара Бориславова, С. Джумайска, Ю. Романова, Ю. Загранярски, А. Иванова

„Теоретично охарактеризиране на потенциални сини TADF емитери за OLED – енергии и кинетика на възбудените състояния“

11:40 12:00 Marianna Vasilaki, N. Ilieva, G. Gocheva, S. Iliev, A. Ivanova

„Структурен анализ на фолат-базирани конюгати за активно насочване към α -фолатен рецептор на базата на молекулнодинамични симулации“

12:00 12:20 Иван Атанасов, Б. Гълъбов, С. Илиева, Д. Чешмеджиева, Х. Шейфър III

„Реакционна способност при ароматно бензилиране по Фридел-Крафтс: роля на електрофилния реагент“

12:20 12:40 Обедна почивка

12:40 13:00 Ростислава Ангелова, Г. Ставраков, Д. Спасов, Г. Момеков, М. Атанасова

„Фероценови аналози на иматиниб и нилотиниб: in silico изследване на механизма на инхибиране с абелсонова тирозин киназа (ABL1 TK)“

13:00 13:20 Вероника Петкова, Х. Рашеев, А. Таджер

„Термодинамика на термична деградация на кислород-съдържащи групи в твърд въглерод“

Секция „Физикохимия“

- 13:20 13:40 Маргарита Стефанова, Д. Шандурков, С. Гуцов, Н. Данчова
„Синтез на въглеродни квантови точки чрез хидротермален метод и анализ на техните оптични свойства“
- 13:40 14:00 Васил Иванов, В. Тончев
„Моделиране на групиране и меандриране върху вицинални повърхности“
- 14:00 14:20 Николай Христов, А. Ризаков
„Анализ на материалите и методите за изпитване на маслени разпределителни трансформатори“

14:20 14:40 Кафе-пауза

- 14:40 15:00 Ясена Статкова, Й. Трифонова, В. Лилова
„Сравнителен анализ на някои физикохимични свойства на обемни халкогениди от системите Ge-Te₄-Cu, Ge-Te₅-Cu и Ge-Te₆-Cu“

Секция „Катализ“

- 15:00 15:20 Владимир Григоров, М. Цветков
„Ефект на заместване на Fe³⁺ с Cr³⁺ при LnFe_{1-x}Cr_xO₃ (Ln=Sm,Gd) върху фотокаталитичните свойства“

Секция „Неорганична химия“

- 15:20 15:40 Павел Николов, А. Сурчев, М. Цветков
„Луминесцентни свойства и охарактеризиране на Eu₂Hf₂O₇, модифициран с различни четиривалентни йони“
- 15:40 16:00 Антоний Сурчев, Й. Захариева, М. Цветков
„Синтез и охарактеризиране на съдотиран гадолинев пирогерманат със самарий и бисмут“
- 16:00 16:20 Магдалина Попова, М. Цветков, Д. Еленкова
„Разработка на луминесцентни лантаноидни метал-органични рамки и техни композитни филми за детекция на замърсители във водни среди“

16:20 16:40 Кафе-пауза

- 16:40 17:00 Александрина Тасева, Н. Ангелова, М. Костадинов, Г. Йорданов
„Синтез и охарактеризиране на наноструктурирани смесени калциево-цинкови и калциево-манганови фосфати“
- 17:00 17:20 Калина Великова, Т. Спасов, С. Колев
„Полимерно инклузивни мембрани за твърдофазна екстракция. Ефект на стъклени нишки в ПИМ“
- 17:20 17:40 Лилия Стоименова, А. Александрова, М. Матракова, П. Николов
„Структурни и химични характеристики на частици оловен моносиликат и тяхното влияние върху циклична устойчивост на оловно-киселинни батерии“

- 17:40 18:00 Виктор Янев, М. Недялков, Е. Василева, П. Цветков, Е. Жечева, Т. Спасов, Р. Стоянова
„Електрохимично изследване на влиянието на лантаноидни оксиди върху окислително–
редукционната миграция на наночастици в катоди от Li_2RuO_3 “
- 18:00 18:20 Димитър Бойчев, Б. Бурдин, Д. Владикова
„Цифрови методи за построяване на емулятор на презареждаема батерия“
- 18:20 18:40 Lama Mzek, М. Atanassova
„Selective Solvent Extraction of Fe(III) Using Novel Chelating Ligands: Effect of Ionic Liquid and
Chloroform Media“

21 май 2026, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Фитохимия и фармакогнозия“

- 9:00 9:20 Мирослав Бояджиев, Т. Груйкин, А. Стоянов, А. Неделчева
*„Изследване на млади представители на *Reynoutria japonica*“*
- 9:20 9:40 Ралица Стоянова, А. Стоянов, А. Неделчева
„Пиролизидинов алкалоиди в растителни видове от България: качествено и количествено определяне с метилоранж“
- 9:40 10:00 Траян Груйкин, А. Стоянов, А. Неделчева
„Степен на набъбване и микроскопско характеризиране на слюзта от семена на различни видове цитруси“

Секция „Органична химия“

- 10:00 10:20 Християна Янчева, М. Богданов, В. Любомирова, В. Митева, Ст. Иванова, П. Христова, И. Рапшева
„Оценка на съдържанието на микроелементи в биологична матрица кърма“

10:20 10:40 Кафе-пауза

- 10:40 11:00 Жени Пеева, П. Ангелов, Й. Сапунджиева
„Синтез на хинолиновия алкалоид Еволионин С“
- 11:00 11:20 Деница Бъчварова, П. Ангелов, Й. Сапунджиева, П. Недялков
„Синтез на 3-карбоксамидни аналози на бактериалния метаболит 2-бензил-4(1H)-хинолон“
- 11:20 11:40 Мария Иванова, Й. Захаријева, М. Цветков, В. Morgenstern, И. Колева, Д. Шандурков, Р. Ляпчев
„Получаване, структура и оптични свойства на някои арилхинолинови системи“
- 11:40 12:00 Дона Саралиева, Н. Петкова-Янкова, А. Колева, Р. Николова
„Синтез и спектрални характеристики на кумарини, получени от катехоли чрез реакцията на Пехман“
- 12:00 12:20 Симона Годава, А. Колева, К. Симеонова, Н. Петкова-Янкова, Р. Николова
„Приложение на 3-аминокумарините за получаване на Шифови бази“

12:20 13:00 Обедна почивка

Секция „Химични и фармацевтични технологии“

- 13:00 13:20 Ралица Узунова, Р. Станимирова, К. Данов, Т. Гърков
„Повърхностни и обемни свойства на смеси от летливи амфифили и натриев додецил сулфат“
- 13:20 13:40 Петър Борисов, Ф. Мустан, З. Митринова, С. Чолакова
„Разтвори на есцин: Ефект от рН и електролити върху тяхното поведение“
- 13:40 14:00 Зорница Зарева, П. Борисов, Д. Чолакова
„Охарактеризиране фазовото поведение на захарни естери в разтвори с различни полярности“
- 14:00 14:20 Максим Димитров, Ж. Вълкова, Н. Новачев, З. Винаров, С. Чолакова
„Изследване на структурните и физикохимичните свойства на лекарствени гелове с кетопрофен“

14:20 14:40 Кафе-пауза

- 14:40 15:00 Христина Мирчева, Й. Съйков, Н. Холмсток, Ян Бевернаж, С. Арора, А. Паудел, З. Винаров
„Механизми на разтваряне на аморфни твърди дисперсии“
- 15:00 15:20 Стилиян Колев, В. Петков, З. Винаров
„Влияние на молекулната маса на полимера и състава на изкуствените чревни течности върху свойствата на аморфни твърди дисперсии“
- 15:20 15:40 Йордан Съйков, К. Амсомс, Л. Маккуйин, Ян Бевернаж, К. Тристерт, З. Винаров
„Стабилност на пептиди в стомашно-чревния тракт“
- 15:40 16:00 Цветелина Димитрова, Л. Винарова, З. Винаров
„Ефект на рН върху солубилизацията на активни вещества в изкуствени чревни течности“
- 16:00 16:20 Мария Миткова, Х. Мирчева, З. Винаров
„Роля на вида на мазнините при фармакокинетични взаимодействия храна-лекарство“

16:20 16:40 Кафе-пауза

- 16:40 17:00 Станислава Иванова, Х. Петков, Цв. Сарафска, Т. Спасов
„Синтез и характеристика на хитозанови нановлакна и комплекси хитозан – сребърни наночастици с антибактериално действие“
- 17:00 17:20 Гергана Иванова, А. Бакалова, Б. Младенова
„Иновативни нанокмозити на основата на монтморилонит за високоефективни системи за съхранение на енергия“

Секция „Биохимия“

- 17:20 17:40 Ahmed Uzair Butt, V. Grigorov, Y. Georgiev
„Energy drinks: a biochemical and metabolic analysis“
- 17:40 18:00 Ерай Емин, М. Янева, Й. Георгиев
„Промени в нивата на стомашно-чревни хормони при анорексия нервоза“

Секция „Методика на обучението по химия“

- 18:00 18:20 Иво Лозанов, Н. Стаменов
„Практически насоки при преподаването и оценяването по химия в рамките на Модул 4. от втори гимназиален етап“

22 май 2026, Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция „Полимери“

- 9:00 9:20 Марин Симеонов, Б. Костова, Р. Михайлова, Е. Василева
„Синтез, свойства и потенциал за дермално доставяне на дексаметазон чрез хидрогелове на взаимнопроникващи полимерни мрежи (мет)актрилатни полимери“
- 9:20 9:40 Анелия Нейчева, Д. Николова, Е. Василева
„Йоногелове като системи за трансдермално лекарствено доставяне“
- 9:40 10:00 Николай Петров, К. Русева, Е. Василева
„Поли(сулфобетаин метакрилатни) йоногелове с висока йонна проводимост и термична стабилност“
- 10:00 10:20 Анна Пранчева, К. Каменова, Г. Грънчаров, А. Василев, П. Петров
„Полимерни мицели, натоварени със стиролови багрила за ДНК маркиране и клетъчна визуализация“

10:20 10:40 Кафе-пауза

Секция „Аналитична химия“

- 10:40 11:00 Мила Московска, В. Михайлова
*„Трансфер и биохимично разпределение на потенциално токсични елементи в *Taraxacum officinale* от антропогенно повлияни почви“*
- 11:00 11:20 Лъчезара Милкова, В. Йотова, И. Беловеждова, В. Михайлова, С. Цаковски
„Определяне на натрупването на потенциално токсични елементи в седименти на язовир Пчелина“
- 11:20 11:40 Жулиян Желязков, Г. Иванова, Т. Йорданова, Б. Тодоров, И. Беловеждова
„Разработване на метод за екстракция на ^{241}Am с помощта на дълбоко евтектични смеси“
- 11:40 12:00 Виктория Грозданова, И. Панчева
„Смесено-лигандни комплекси на кобалт(II) с Монензин и аминокиселини“

12:00 13:00 Обедна почивка

- 13:00 13:20 Владислав Михалков, Р. Атанасова, С. Георгиева
„Качествен контрол на домашен сапунен продукт с цел определяне на съдържанието на 1,2,3-пропантриол и алкалност“
- 13:20 13:40 Калина Михайлова, М. Богданов
„Сравнителен анализ на мастнокиселинния профил на млечни продукти от животински и растителен произход чрез GC-FID“

Секция „Фармацевтична химия“

- 13:40 14:00 Никол Георгиева, В. Гелев
„Синтез на нов реагент за изследване на клетъчни рецептори“
- 14:00 14:20 Катрин Харалампиева, Д. Чешмеджиева, А. Василев
„Нови хинолиниевы соли, съдържащи пиперазинов фрагмент с неочаквани фотофизични свойства при взаимодействие с ДНК“

14:20 14:40 Кафе-пауза

- 14:40 15:00 Кирила Йовчева, Ю. Романова, М. Недялкова
„Изграждане на PFAS набор от данни за машинно обучение и QSAR моделиране“
- 15:00 15:20 Velislava Stoycheva, M. Katsarova, I. Iliev, S. Georgieva, V. Delchev, N. Toshev
„Pyridine-based structural modifications in fluoxetine: a DFT and ADMET study“
- 15:20 15:40 Teodor Dimankov, M. Vlasheva, I. Dimitrov, I. Iliev, S. Georgieva, V. Delchev, N. Toshev
„Quantum-chemical and In Silico Evaluation of Structurally Modified Analogues of Gepotidacin by DFT and ADMET“
- 15:40 16:00 Pavlina Kalaglarska, Y. Uzunova, N. Toshev
„Pharmacophore design of PROTAC-based androgen receptor degraders: insights from Bavdegalutamide“
- 16:00 16:20 Armina Abdollahi, N. Toshev, K. Mihalev, I. Iliev, Y. Uzunova, V. Delchev, N. Agova, S. Georgieva
„Electronic structure, reactivity, and predicted biological activity of halogenated isatin-pyridine Schiff bases: a DFT study“

16:20 16:40 Кафе-пауза

- 16:40 17:00 Ovanes Muradyan, N. Toshev, I. Dimitrov, V. Delchev, T. Dudev
„How boron compounds bind and inhibit the proteasome: a DFT study“
- 17:00 17:20 Gergana Angelova, N. Toshev, Y. Uzunova, D. Cheshmedzhieva, T. Dudev
„Romidepsin and selenium-modified analogues as HDAC inhibitors: a computational study of binding modes“
- 17:20 17:40 Kristiyan Velichkov, A. Abdollahi, N. Toshev, Y. Uzunova, D. Cheshmedzhieva, T. Dudev
„Metal affinity and selectivity of benzamide-based histone deacetylase inhibitors“
- 17:40 18:00 Konstantin Dichev, Y. Uzunova, K. Eneva, S. Georgieva, T. Dudev, D. Cheshmedzhieva, D. Dimitrova, G. Angelova, I. Dimitrov, N. Toshev
„Repurposing of histone deacetylase inhibitors for leishmaniasis treatment: from oncology to antiparasitic therapy“
- 18:00 18:20 Reneta Koseva, Antonia Maznikova, N. Toshev, V. Delchev, S. Dimitrova, D. Cheshmedzhieva, T. Dudev
„Computational insights into the binding mode of thiazolidinedione-based inhibitors in the HDAC active site“

18:40 19:00 Закриване, 130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

19:00 Коктейл, пред 210 аудитория

СЕКЦИЯ ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ

Поля Колева, ФХФ – СУ

Анастасия Язова, ФХФ – СУ

Иво Лозанов, ФХФ – СУ

Чара Бориславова, ФХФ – СУ

Марияна Васибеки, ФХФ – СУ

Иван Атанасов, ФХФ – СУ

Ростислава Ангелова, МУ – София

Вероника Петкова, ФХФ – СУ

DFT МОДЕЛИРАНЕ НА КОМПЛЕКСИ НА Rh КАТИОНИ В ПОРИТЕ НА BEA ЗЕОЛИТ

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

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

Зеолитите представляват микропорести кристални вещества и имат ключова роля в хетерогенния катализ, поради йонообменните си свойства, наличието на киселинни и метални центрове в структурата им и добре дефиниран размер на порите. Множество процеси, сред които хидрокрекинг на тежки нефтени фракции и изомеризация на леки бензинови фракции, протичат с участието на протонирана форма на зеолит, съдържаща H^+ катиони – Брьонстедови (Brønsted) киселинни центрове. Зеолитните катализатори, съдържащи метални катиони, се използват широко в процеси като селективната каталитична редукция на азотни оксиди, прилагана за пречистване на отработените газове от дизелови двигатели [1]. Rh катиони с CO и NO молекули също проявяват каталитична активност при важни индустриални реакции, като хидрогениране на алкени и алдехиди съответно до алкани и алкохоли, както и хидроформиране на алкени до получаване на алдехиди [2].

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 BEA, чрез периодични квантовохимични изчисления, проведени с програмен пакет VASP и обменно-корелационен функционал PBE. Също така разгледахме и техни моно- и ди- карбонилни и нитрозилни комплекси. Изследвано бе влиянието на тези лиганди върху стабилността на родиевите катиони. Изчислени бяха C–O и N–O вибрационните честоти, както и енергиите на свързване на лигандите. Посредством реакции на превръщане бе установен редът на стабилност както на структурите с родиеви катиони, така и на техните карбонилни и нитрозилни комплекси.

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.

DFT МОДЕЛИРАНЕ НА ОБРАЗУВАНЕТО/РАЗКЪСВАНЕТО НА C–C ВРЪЗКА ВЪРХУ FCC ПРЕХОДНИ МЕТАЛИ

Анастасия Язова, Масуме Кейханиан, Искра Колева, Християн Александров

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

Хетерогенният катализ заема ключово място в редица процеси с фундаментално значение за химичната индустрия, при които ефективността и устойчивостта на катализаторите са от съществено значение. Сред най-широко използваните каталитични системи се открояват преходните метали със стенноцентрирана кубична (*fcc*) решетка, като в хода на голяма част от протичащите върху повърхностите им реакции се наблюдава образуване или разкъсване на връзки от вида C–C. Тези процеси са тясно свързани с нежеланото натрупване на въглеродни отлагания („коксообразуване“), водещо до деактивиране на катализатора.

В настоящото изследване чрез теорията на функционала на плътността (DFT) е проучено взаимодействието на въглеродни частици с (111) повърхности на *fcc* преходни метали (Rh, Ir, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag и Au). Анализирани е стабилността на изолирани два въглеродни атома (C + C) и въглероден димер (C₂), както и тяхното предпочитание към повърхностни или подповърхностни сорбционни позиции.

Резултатите показват, че димерът се стабилизира на повърхността, докато изолираните въглеродни атоми в повечето случаи предпочитат подповърхностни позиции, което предполага съществена разлика в тяхната роля при началните етапи на образуване на въглеродни отлагания. Изчислени бяха и реакционните (ΔE) и активиращите (E_a) енергии на процесите на разкъсване (C₂ → C + C) и образуване (C + C → C₂) на връзка C–C. Наблюдава се ясно изразена зависимост от природата на метала: металите от група 10 благоприятстват разкъсването на връзката, докато при тези от група 11 процесът е термодинамично и кинетично неблагоприятен.

Получените резултати допринасят за разбирането на взаимодействието между въглерода и металните повърхности и подпомагат разработването на по-устойчиви на въглеродно отравяне каталитични системи.

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.

СТРУКТУРА И СПЕКТРАЛНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ НА Pt(II) КОМПЛЕКС, ПОЛУЧЕН ПРИ РЕДУКЦИЯ НА TACIPLATIN С БИОЛОГИЧНИ РЕДУКТОРИ: КОМБИНИРАНО ТЕОРЕТИЧНО И ЕКСПЕРИМЕНТАЛНО ИЗСЛЕДВАНЕ

Иво И. Лозанов¹, В. Велчева^{1,*}, Ю. Романова^{1,*}, А. Угринов², Н. Бурджиев¹, Г. Генчева¹

¹ Faculty of Chemistry and Pharmacy, Sofia University 'St. Kliment Ohridski', Lozenets, James Bourchier Blvd. 1, Sofia, Bulgaria, e-mail: v.velcheva@chem.uni-sofia.bg; jromanova@chem.uni-sofia.bg

² Department of Chemistry and Biochemistry, North Dakota State University, Fargo, ND 58102, USA

В търсенето на нови лекарства на основата на метални комплекси, които предлагат алтернативни механизми на противотуморно действие, наскоро бе предложен октаедричен Pt(IV) комплекс на тридентатния лиганд *cis*-2,4,6-триаминоциклохексан-1,3,5-триол (*taci*) с неklasическа структура и молекулна формула *fac*-[Pt(*taci*)₃]I. В *in vitro* експерименти бе доказано, че активният комплексен вид във физиологично моделирани условия се характеризира с фундаментално различен механизъм на противотуморно действие и потенциал за преодоляване на механизмите на цисплатин-резистентност. Един от приеманите класически механизми на противотуморно действие за комплексите на Pt(IV) е редукция до плоско-квадратни комплекси на Pt(II) с *cis*-разположени напускащи лиганди. В настоящото изследване се изучава взаимодействието на *taci*platin с биологичните редуктори L-цистеин и глутатион във водна среда и доказва структура и спектрални характеристики на получения Pt(II) комплекс при редукцията.

Теоретично структурите, ¹H-ЯМР химичните отмествания и UV-Vis спектрите на изходния комплекс [Pt(*taci*)I₃]⁺, както и на редуцираната форма [Pt(*taci*)I₂] са изучени с AIMD и DFT/TD-DFT методи. Ефектът на разтворителя е отчетен експлицитно в AIMD симулациите и имплицитно чрез модела РСМ при DFT изчисленията. Статичните DFT/TD-DFT изчисления показват добро съответствие с експерименталните данни за [Pt(*taci*)I₃]⁺, но се оказват недостатъчни за точното описание на [Pt(*taci*)I₂]. С прилагане на AIMD симулациите, които описват динамичните взаимодействия между [Pt(*taci*)I₂] и водните молекули, бяха намерени конформации със спектрални характеристики, съответстващи на експериментално наблюдаваните. Установено бе, че [Pt(*taci*)I₂] е основният продукт на редукцията. Получените резултати подчертават определящата роля на експлицитния разтворител и динамичните ефекти за моделиране на поведението на платиновите противоракови агенти.

Цитати:

1 V. Velcheva *et al.*, *Pharmaceutics* **2022**, 14, 2057. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14102057>.

Благодарности: Авторите изразяват благодарност за финансовата подкрепа на проект ФНИ-СУ №80-10-228/27.04.26. Вяра Велчева благодари за финансовата подкрепа от Европейски съюз по Плана за възстановяване и устойчивост на Република България, проект SUMMIT BG-RRP-2.004-0008-C01.

ТЕОРЕТИЧНО ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА ПОТЕНЦИАЛНИ СИНИ TADF ЕМИТЕРИ ЗА OLED – ЕНЕРГИИ И КИНЕТИКА НА ВЪЗБУДЕНИТЕ СЪСТОЯНИЯ

Чара Бориславова, Симона Джумайска, Юлия Романова, Юлиан Загранярски,
Анела Иванова

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

Устройства съдържащи органични светодиоди (OLED) заемат все по-голям дял от световния пазар. Причини за това са яркостта, липсата на допълнителна подсветка и възможността за огъване. Въпреки привлекателните си качества, OLED все още не постигат ефективността на светене на конвенционалните светодиоди, особено що се отнася до излъчване на синя светлина. Едно от решенията е дизайн на багрила, които проявяват термично активирана забавена флуоресценция (TADF). Това налага изискване за съединения с много малка енергетична разлика между най-ниските по енергия синглетно и триплетно възбудени състояния ($\Delta(S_1-T_1) < 0.25$ eV) [1] и бърза кинетика на пренос на възбуждане.

В доклада са представени резултати от теоретична оценка на оптичните свойства на серия от съединения базирани на индолокарбазол. Като най-обещаващи са отличени две съединения, за които са разгледани подробно скоростните константи на процесите във възбудено състояние. За тях са направени и изчисления за вибронното взаимодействие, чрез които са идентифицирани фрагментите от молекулите подпомагащи протичането на обратна интеркомбинационна конверсия – процес ключов за TADF.

Благодарности: Изчисленията в разработката са финансирани по проект № КП-06-КИТАЙ/11 от 16.12.2024 г. на Фонд „Научни изследвания“.

Цитати:

1. I. Siddiqui, S. Kumar, Y.-F. Tsai, P. Gautam, Shahnawaz, K. Kesavan, J.-T. Lin, L. Khai, K.-H. Chou, A. Choudhury, S. Grigalevicius, J.-H. Jou, *Nanomaterials* **2023**, 13, 2521

СТРУКТУРЕН АНАЛИЗ НА ФОЛАТ-БАЗИРАНИ КОНЮГАТИ ЗА АКТИВНО НАСОЧВАНЕ КЪМ α -ФОЛАТЕН РЕЦЕПТОР НА БАЗАТА НА МОЛЕКУЛНОДИНАМИЧНИ СИМУЛАЦИИ

Marianna Vasilaki, Nina Ilieva, Gergana Gocheva, Stoyan Iliev, Anela Ivanova

*Laboratory of Quantum and Computational Chemistry, Faculty of Chemistry and Pharmacy,
Sofia University "St. Kliment Ohridski", 1 James Bourchier blvd., 1164 Sofia, Bulgaria,
fhmv@chem.uni-sofia.bg*

Конвенционалната химиотерапия се използва широко в лечението на онкологични заболявания през последните десетилетия. Този терапевтичен подход обаче има редица съществени недостатъци, което налага създаването и прилагането на иновативни стратегии. В този контекст, разработването на системи за доставка на лекарства (DDSs) с активно насочване се основава на свързването на химиотерапевтика с векторна молекула, която контролира неговото доставяне и освобождаване в специфични типове ракови клетки чрез разпознаване на характерните клетъчни компоненти [1].

α -Фолатният рецептор (FR α) е мембранно-свързан протеин с висок афинитет към фолат, който участва в рецептор-медирана ендоцитоза - ключов процес при доставката на молекули за синтеза на ДНК и клетъчния растеж. FR α има способността да се свръхекспресира както в здравите така и в злокачествени клетки, и именно тази негова характеристика го определя като подходяща целева макромолекула за селективно доставяне на терапевтични агенти чрез използването на фолат-базирани конюгати [2].

Набор от обещаващи фолат-базирани конюгати са изследвани като потенциални векторни молекули за рецептор-специфично доставяне на химиотерапевтика доксорубин (DOX). Настоящото проучване проследява поведението на конюгатите при физиологични условия чрез прилагането на молекулно-динамични симулации. Сравнителният структурен анализ на различните конюгирани системи позволява идентифицирането на оптимални комбинации от спейсърни и линкерни фрагменти, както и ключовите взаимодействия за структурната подвижност на комплексите. Получените резултати предоставят насоки за конструирането на перспективни високо ефективни биосъвместими конюгати за специфично доставяне на DOX към FR α -експресиращи туморни клетки.

-
- 1 Senapati, S.; Mahanta, A. K.; Kumar, S.; Maiti, P. *Signal Transduct. Target Ther.* **2018**, 3, 7.
 - 2 Gonzalez, T.; Muminovic, M.; Nano, O.; Vulfovich, M., *Int.J.Mol.Sci.* **2024**, 25, 2, 1046

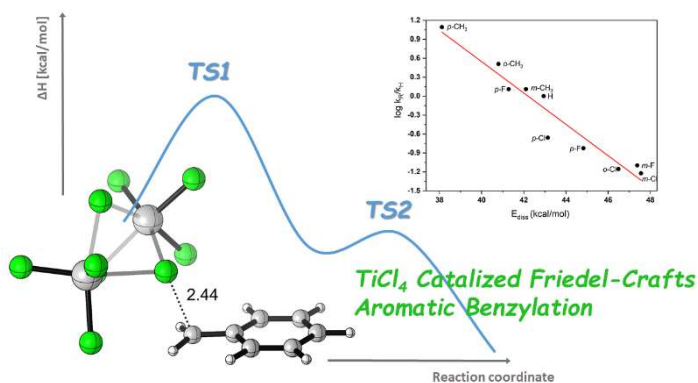
РЕАКЦИОННА СПОСОБНОСТ ПРИ АРОМАТНО БЕНЗИЛИРАНЕ ПО ФРИДЕЛ-КРАФТС: РОЛЯ НА ЕЛЕКТРОФИЛНИЯ РЕАГЕНТ

Иван Атанасов¹, Борис Гълъбов¹, Соня Илиева¹, Диана Чешмеджиева¹,
Хенри Шейфър III²

¹ Факултет по химия и фармация, Софийски университет, София 1164, България, e-mail: i.atanas.031@gmail.com

² Център по изчислителна квантова химия, Университет на Джорджия, Атланта, Джорджия, САЩ

Изследвана е реакцията на бензилиране на бензен със заместени бензилхлориди в нитрометан, катализирана от TiCl_4 с помощта на теорията на функционала на плътността (DFT). Изследваната реакция на електрофилно ароматно заместване (EAS) е доста необичайна, тъй като, за разлика от повечето EAS реакции, последните експериментални кинетични данни показват, че ароматният субстрат не участва в кинетичното уравнение на процеса. За да се изясни този неочакван експериментален резултат, е проведено теоретично изследване на реакционния механизъм с помощта на M06-2X функционала в комбинация с няколко базисни набора: 6-311+G(d,p), 6-311+G(2df,2p) и def2-TZVPP. Поради добре известните трудности при оценяване на реалистични бариери на свободната енергия за органични реакции, е използвана комбинация от теоретично изчислени енталпийни бариери и наличния ентропиен принос от кинетични експерименти. Установено е, че скоростта на тази EAS реакция действително не зависи от природата на ароматния субстрат.



Серия от десет заместени (в ароматния пръстен) бензилхлорида, използвани като реактиви в бензилирането по Фридел-Крафтс, е охарактеризирана чрез различни теоретични индекси на реактивоспособност. Теоретичните параметри са съпоставени с експерименталните относителни скорости на бензилиране. Реакционната способност за десетте бензилхлорида корелира с енергията на дисоциация на връзката C-Cl и с Хиршфелд заряда при хлорния атом.

ФЕРОЦЕНОВИ АНАЛОЗИ НА ИМАТИНИБ И НИЛОТИНИБ: *IN SILICO* ИЗСЛЕДВАНЕ НА МЕХАНИЗМА НА ИНХИБИРАНЕ С АБЕЛСОНОВА ТИРОЗИН КИНАЗА (ABL1 ТК)

Ростислава Ангелова, Георги Ставраков, Данислав Спасов, Георги Момеков,
Марияна Атанасова

Медицински университет – София, Фармацевтичен факултет, ул. „Дунав“ 2, 1000
София, 105645@students.mu-sofia.bg; stavrakov@pharmfac.mu-sofia.bg;
dspassov@pharmfac.mu-sofia.bg; gmomekov@pharmfac.mu-sofia.bg;
matanasova@pharmfac.mu-sofia.bg

Органометалните съединения, съдържащи фероценов (Fc) фрагмент, привличат нарастващ интерес в медицинската химия поради уникалните си редокс и стерични свойства. Настоящото изследване изяснява механизма на свързване и динамичната стабилност на фероценови аналози на иматиниб и нилотиниб в ABL1 чрез интегриран *in silico* подход.¹

Структурите бяха оптимизирани чрез DFT (B3LYP/def2-TZVP), последвано от молекулен докинг и MM-GBSA ранкиране. Молекулният докинг беше валидиран по отношение на възпроизвеждане на кристалната поза и разграничаване на активни от неактивни съединения. Процедурата успешно отличи неактивните от активните фероценови производни (**9** и **15a**), които бяха подложени на молекулно-динамични симулации.

Резултатите разкриват неklasически механизъм на инхибиране без участие на hinge региона. Свързването се стабилизира чрез взаимодействия с Asp381 от DFG мотива и катион-π контакти с Lys271. Запазването на затворена Р-бримка подкрепя механизма на ligand trapping.^{2,3} Допълнителен геометричен анализ предполага π-π и катион-π взаимодействия между фероценовия фрагмент и Tyr253, допринасящи за стабилизацията на затворена Р-бримка.

Настоящото изследване е финансирано от Европейския съюз – Next Generation EU – чрез Националния план за Възстановяване и Устойчивост на Република България, проект № BG-RRP-2.004-0004-C01.

- 1 I. Philipova, R. Mihaylova, G. Momekov, R. Angelova and G. Stavrakov, *RSC Med. Chem.*, **2023**, *14*, 880–889.
- 2 D. S. Spassov, M. Atanasova and I. Doytchinova, *IJMS*, **2023**, *24*, 11610.
- 3 D. S. Spassov, *Drug Discovery Today*, **2026** (accepted)

ТЕРМОДИНАМИКА НА ТЕРМИЧНА ДЕГРАДАЦИЯ НА КИСЛОРОД-СЪДЪРЖАЩИ ГРУПИ В ТВЪРД ВЪГЛЕРОД

Вероника Петкова, Христо Рашеев, Аля Таджер

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

Отличник сред обещаващите анодни материали в натриево-йонните батерии е твърдият въглерод (НС). Той има неподредена структура, съставена от произволно ориентирани и огънати графитни домени, дефекти във въглеродната структура и нанопори. Дори при карбонизация слоевете му остават неподредени и съдържат дефекти, които подпомагат навлизането на натриеви йони [1]. Известно е, че съдържа основно въглерод, а сред останалите елементи с най-голям дял е О и с по-малък N и следи от S, но ролята на функционалните групи все още не е напълно изяснена.

Нашите задачи са две: от една страна да моделираме възможните реакции на деградация на кислород-съдържащите функционални групи по време на термичната обработка на получен от биомаса НС и да оценим термодинамичните условия за реализация на тази деградация, а от друга – да оценим потенциала реализиран от взаимодействието на функционалните групи с натрий. Използвана е теорията на функционала на плътността за определяне на най-вероятните пътища на разпад на функционалните групи в различни температурни интервали. Подбрани са ромбични модели с диагонал до 15 Å, съответстващи на размера на псевдографитните домени в твърд въглерод, получени експериментално. Изчислена е свободната енергия на термичен разпад на различни функционални групи.

Тази работа дава нов поглед върху ролята на кислорода в НС и би подпомогнала дизайна на анодни материали от ново поколение натриево-йонни батерии.

Цитати:

- 1 Rajh, A., et al. (2024). Structural and chemical analysis of hard carbon negative electrode for Na-ion battery with X-ray Raman scattering and solid-state NMR spectroscopy. *Carbon*, 228, 119398

СЕКЦИЯ ФИЗИКОХИМИЯ

Маргарита Стефанова, ФХФ – СУ

Васил Иванов, ФМИ – СУ

Николай Христов, ЮЗУ

Ясена Статкова, ХТМУ

СИНТЕЗ НА ВЪГЛЕРОДНИ КВАНТОВИ ТОЧКИ ЧРЕЗ ХИДРОТЕРМАЛЕН МЕТОД И АНАЛИЗ НА ТЕХНИТЕ ОПТИЧНИ СВОЙСТВА

Маргарита Стефанова, Димитър Шандурков, Стоян Гуцов, Нина Данчова

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

В настоящата работа е представен хидротермален синтез на квантови точки при различни съотношения на лимонена киселина и урея, както и при различни експериментални условия по хидротермален метод. Целта на изследването е да се оцени влиянието на състава на прекурсора и синтетичните параметри върху оптичните свойства на получените въглеродни наноразмерни системи в разтвор¹⁻³. Получените проби са охарактеризирани чрез UV-Vis спектроскопия, фотолуминесцентна спектроскопия и трансмисионна електронна микроскопия (ТЕМ). Резултатите показват значителни различия в абсорбционните и емисионните свойства в зависимост от условията на синтез, което предполага възможност за контрол върху оптичните свойства на материалите. ТЕМ анализът потвърждава образуването на наночастици с различна морфология и размер. Изследването демонстрира потенциала на хидротермалния метод за контролируем синтез на квантови точки с приложими оптични свойства.

Цитати:

- 1 Lai, X. et al. (2020) *Hydrothermal synthesis and characterization of nitrogen-doped fluorescent carbon quantum dots from citric acid and urea* Ferroelectrics, 566(1), 116–123
- 2 Sun, Y.-P. et al. (2006) *Quantum-sized carbon dots for bright and colorful photoluminescence*, Journal of the American Chemical Society, 128, 7756–7757
- 3 Baker, S. N., & Baker, G. A. (2010) *Luminescent carbon nanodots: emergent nanolights*, Angewandte Chemie International Edition, 49, 6726–6744.

МОДЕЛИРАНЕ НА ГРУПИРАНЕ И МЕАНДРИРАНЕ ВЪРХУ ВИЦИНАЛНИ ПОВЪРХНОСТИ

Васил Иванов¹, Веселин Тончев²

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

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

Вициналните повърхности и тяхното контролируемо постъпателно движение в процесите на епитаксия са от ключов интерес за получаването на атомно гладки повърхности и покрития с технологично приложение. Моно-стъпалата от вициналната повърхност се явяват енергетично изгодни центрове, към които да се свързват адатомите чрез т.нар. attachment to step и attachment to kink. Равномерното движение, обаче, може да бъде нарушено заради асиметрия в скоростта на свързване пред и зад стъпалото, което води до появяването на нестабилности на групиране и меандриране върху повърхността. При тях се формират (мезоскопски) структури – групи и меандри от стъпала, които нарушават процеса на получаване на гладки повърхности.

Теоретичната парадигма до момента се базира основно на това, че групирането и меандрирането са следствия от т.нар. обратен и прав Ерхлих-Швьобелов ефект, съответно. Това води до разбирането, че двете нестабилности следва да са несъвместими. Експерименталните резултати обаче показват, че съществуват материални системи, при които са на лице три режима – на групиране, меандриране и на *едновременно меандриране и групиране*.¹⁻³

В доклада ще бъде представен един опростен модел на меандриране и групиране под формата на система частни диференциални уравнения⁴⁻⁷:

$$\frac{\partial u_n}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2} - \kappa_a (\Delta u_n^{-p} - \Delta u_{n+1}^{-p}) + \kappa_r (\Delta u_n^{-q} - \Delta u_{n+1}^{-q})$$

Ще бъдат представени морфологични диаграми, които систематизират получените от симулации структури. Тези диаграми ще бъдат сравнени с такива, получени от друг модел, основан на клетъчни автомати.

В края на доклада ще бъдат представени някои теоретични резултати, които свързват моделирането на тези нестабилности с теорията за спинодален разпад на Allen-Cahn.

Цитати:

- 1 B. Galiana, M. Benedicto and P. Tejedor, Journal of Applied Physics, DOI:10.1063/1.4774215.
- 2 L. Huo, R. Lingaparthi, N. Dharmarasu and K. Radhakrishnan, Thin Solid Films, 2024, 808, 140572.
- 3 F. K. de Theije, J. J. Schermer and W. J. P. van Enckevort, Diamond and Related Materials, 2000, 9, 1439–1449.
- 4 D. Kandel and J. D. Weeks, Physical Review B, 1994, 49, 5554–5564.
- 5 C. R. Connell, Physica D: Nonlinear Phenomena, 2004, 189, 287–316.
- 6 T. J. Stasevich and T. L. Einstein, Multiscale Modeling and Simulation, 2007, 6, 90–104.
- 7 A. Krasteva, H. Popova, F. Krzyżewski, M. Załuska-Kotur and V. Tonchev, in AIP Conference Proceedings, AIP Publishing LLC, 2016, vol. 1722, p. 220014.

АНАЛИЗ НА МАТЕРИАЛИТЕ И МЕТОДИТЕ ЗА ИЗПИТВАНЕ НА МАСЛЕНИ РАЗПРЕДЕЛИТЕЛНИ ТРАНСФОРМАТОРИ

Николай Христов¹, Антонио Ризаков²

¹ *ЮЗУ „Неофит Рилски“, ул. „Иван Михайлов“ № 66, гр. Благоевград*

² *ХТМУ, бул. „Климент Охридски“ № 8, гр. София*

Настоящото изследване разглежда значението на физикохимичните свойства на медта и алуминия при производството на разпределителни трансформатори с мощност до 2500 kVA и напрежение до 36 kV, както и методите за тяхното контролно изпитване. Анализирани са основните електрически измервания, изпитванията на изолацията, оценката на загубите и параметрите на намотките. Разгледани са предимствата на медта и алуминия като проводникови материали, включително ролята на изолационните материали и пробивното напрежение. Представена е последователността на изпитванията и условията за провеждането им. Подчертано е значението на контролните измервания за осигуряване на надеждна, безопасна и ефективна работа на трансформаторите.

**СРАВНИТЕЛЕН АНАЛИЗ НА НЯКОИ
ФИЗИКОХИМИЧНИ СВОЙСТВА НА ОБЕМНИ
ХАЛКОГЕНИДИ ОТ СИСТЕМИТЕ
Ge-Te₄-Cu, Ge-Te₅-Cu И Ge-Te₆-Cu**

Ясена Статкова, Й. Трифонова, В. Лилова

*Химикотехнологичен и металургичен университет, катедра „Физика“, 1797 София,
бул. Климент Охридски“ 8, ystatkova@gmail.com*

Изследването сравнява някои физикохимични свойства, като плътност, моларен обем, компактност и процент свободен обем на обемни халкогениди от системите (GeTe₄)_{1-x}Cu_x, (GeTe₅)_{1-x}Cu_x и (GeTe₆)_{1-x}Cu_x, където $x=5; 10; 15$ и $20 \text{ mol\%}$, синтезирани чрез директен еднотемпературен синтез в затворен обем. Влиянието на съотношението Ge/Te и съдържанието на мед върху физикохимичните характеристики на изследваните състави е обсъдено и обяснено от структурна гледна точка. Резултатите показват, че по-високото съдържание на Te в съотношението Ge/Te води до увеличаване на структурната гъвкавост, докато включването на Cu променя конфигурацията на опаковката, което от своя страна води до промяна във физикохимичните свойства по нелинеен начин.

СЕКЦИЯ КАТАЛИЗ

Владимир Григоров, ФХФ – СУ

**ЕФЕКТ НА ЗАМЕСТВАНЕ НА Fe^{3+} с Cr^{3+}
ПРИ $\text{LnFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ($\text{Ln}=\text{Sm}, \text{Gd}$)
ВЪРХУ ФОТОКАТАЛИТИЧНИТЕ СВОЙСТВА**

Владимир Григоров, Мартин Цветков

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

Фотокатализата се утвърди като обещаващ подход за справяне с екологични и енергийни предизвикателства чрез използване на светлинно-индуцирани химични реакции. Настоящото изследване разглежда синтеза, характеризирането и ефективността на полупроводникови фотокатализатори за разграждане на органични замърсители.

Фотокаталитичната активност беше оценена при UV и/или видима светлина, като се наблюдава повишена ефективност в сравнение с конвенционалните катализатори. Подобрената производителност се дължи на фактори като увеличена специфична повърхност, намалена рекомбинация на електрон-дупка и разширен обхват на поглъщане на светлина. Резултатите подчертават потенциала на тези материали за устойчиво пречистване на околната среда от органични замърсители. Бъдещата работа ще бъде насочена към оптимизиране на стабилността и мащабируемостта на катализаторите за практическо приложение.

В настоящето изследване представяме обещаващите резултати от заместването на Fe^{3+} с Cr^{3+} при $\text{LnFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ($\text{Ln}=\text{Sm}, \text{Gd}$) върху фотокаталитичните свойства за разграждане на багрилото метиленово синьо и/или родамин Б. Получените катализатори са структурно и фазово охарактеризирани чрез прахова рентгенова дифракция. Резултатите от проведените каталитични изследвания показват, че материалите имат отлична каталитична активност при фотоактивирани каталитични експерименти. Определен и предложен е механизъм на реакциите чрез серия от експерименти с радикалови гасители.

Благодарности: Това изследване е финансирано от ФНИ чрез договор № КП-06-Н59/12 от 2021 г.

СЕКЦИЯ НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Павел Николов, ФХФ – СУ

Антоний Сурчев, ФХФ – СУ

Магдалина Попова, ФХФ – СУ

Александрина Тасева, ФХФ – СУ

Калина Великова, ФХФ – СУ

Лилия Стоименова, ИЕЕС – БАН

Виктор Янев, ИОНХ – БАН

Димитър Бойчев, ИЕЕС – БАН

Lama Mzek, ХТМУ

ЛУМИНЕСЦЕНТНИ СВОЙСТВА И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА $\text{Eu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$, МОДИФИЦИРАН С РАЗЛИЧНИ ЧЕТИРИВАЛЕНТНИ ЙОНИ

Павел Николов¹, Антоний Сурчев^{1,2}, Мартин Цветков¹

¹ Лаборатория по химия на редкоземните елементи, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучър 1, 1164 София, email: pavelnikolov3103@gmail.com

² Институт по физикохимия „Ростислав Каишев“-БАН, гр. София, ул. „Акад. Георги Бончев“ 11, 1113 София, email: as31878@gmail.com

Луминесцентните материали са в основата на много съвременни технологии и устройства. Много от тях са базирани на йони на редкоземните елементи – например Eu(III) , Tb(III) и други, като за целта тези йони трябва да бъдат вградени в подходяща матрица. Едни от изучаваните в последно време матрици са базирани на пирохлорната структура – $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$ ^[1].

В случая е избран един представител на този тип съединения – европиев пирохафнат – $\text{Eu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$. Пробите са синтезирани с помощта на комбиниран метод – като допълнение на класическия керамичен метод за синтез, изходните вещества са активирани механохимично. Предварителното механохимичното третиране значително намалява времето, необходимо за наляване на пробите и/или необходимата температура. С цел подобряване на свойствата е изследването заместването на част от Hf(IV) с други йони – Si(IV) , Ge(IV) , Sn(IV) , Ti(IV) , Zr(IV) . Заместването с Ge доведе до значително подобряване на луминесцентните свойства, поради което са изготвени проби с различно съдържание на Ge .

Изготвените проби са характеризирани с помощта на различни техники. Фазовият състав е характеризиран с помощта на PXRD. Определянето на оптичните свойства и ширината на забранената зона са охарактеризирани с помощта на DR-UV-Vis. Луминесцентните свойства са характеризирани с помощта на фотолуминесцентна спектроскопия. Определени са и цветовите характеристики на излъчваната светлина.

Цитати:

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

СИНТЕЗ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА СЪДОТИРАН ГАДОЛИНИЕВ ПИРОГЕРМАНАТ СЪС САМАРИЙ И БИСМУТ

Антоний Сурчев^{1,2}, Йоана Захариева¹, Мартин Цветков¹

¹ Лаборатория по химия на рядкоземните елементи, Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, София 1164, България, email: as31878@gmail.com

² Лаборатория за рентгенови дифракционни методи и компютърна томография, Институт по физикохимия „Академик Ростислав Каишев“, Българска академия на науките. София 1113 България.

Вещества от пироклорната група с обща формула $A_2B_2O_7$, са от голям научен интерес поради възможността да се вграждат различни йони на А и В позиции и така да се модифицира структурата на съединенията, чрез което да се получат нови или да се подобрят дадени свойства. Материалите от пироклорен тип имат висока температурна и химическа устойчивост, намират приложение като катализатори, термални защиты, функционални керамики и флуоресцентни материали.

Настоящото изследване се фокусирали върху изследване на голям набор от образци базирани на матрица от $Gd_2Ge_2O_7$ съдотирана със Sm(III) и Bi(III). Изследвани са образците чрез редица физико-химични методи: прахова рентгенова дифракция, UV-Vis спектроскопия, флуоресцентна спектроскопия.

Чрез метод на Ритвелд са установени структурите и параметрите на елементарната клетка; установена е оптична забранена зона на различните образци, както и оптималната концентрация и съотношение на йоните за най-добри флуоресцентни свойства.

РАЗРАБОТКА НА ЛУМИНЕСЦЕНТНИ ЛАНТАНОИДНИ МЕТАЛ-ОРГАНИЧНИ РАМКИ И ТЕХНИ КОМПОЗИТНИ ФИЛМИ ЗА ДЕТЕКЦИЯ НА ЗАМЪРСИТЕЛИ ВЪВ ВОДНИ СРЕДИ

Магдалина Попова¹, Мартин Цветков^{1,2}, Деница Еленкова^{1,2}

¹ Лаборатория по химия на редкоземните елементи, СУ „Св. Климент Охридски“, ФХФ, Катедра Неорганична Химия, 1164 София, бул. „Джеймс Баучер“ №1, e-mail: *magi_192001@abv.bg*

² Център за компетентност “Clean Technologies for Sustainable Environment—Water, Waste, Energy for Circular Economy”, Софийски университет, 1164 София, България

Нарастващата необходимост от ефективни методи за анализ на води стимулира разработването на сензорни материали. Лантаноид-съдържащите метал-органични рамки (Ln-MOFs) съчетават поръзност и стабилност на MOFs с характерните луминесцентни свойства на лантаноидните йони, което ги прави подходящи за детекция на различни замърсители във водна среда^{[3][5]}.

В настоящото изследване са синтезирани и охарактеризирани MOF структури на Eu(III), Tb(III) и смесени Eu/Tb системи с линкър 4,4'-(хексафлуороизопропилиден)добензоена киселина (H₂FPB), проявяващи изразени фотолуминесцентни свойства и сензорен потенциал^[1].

С цел повишаване на практическата приложимост, Ln-MOFs са инкорпорирани в поливинилиденфлуорид (PVDF) и са получени тънки филми. PVDF се отличава с добра химическа устойчивост и стабилност^[4]. В работата е разгледано приложението на филмовите системи, които показват съществени предимства спрямо прахообразните аналози. Сравнителните изследвания показват, че сензорната активност се запазва след имобилизацията, като филмите осигуряват по-лесна манипулация, съкратено време за анализ и възможност за многократна употреба чрез регенерация.^[2] Получените резултати подчертават потенциала на PVDF-интегрираните Ln-MOF филми като ефективен и практически приложим подход за луминесцентен сензорен анализ във водни среди.

Благодарности: Авторите изказват благодарност към Фонд „Научни изследвания“ (проект № КР-06-N69/6) за финансовата подкрепа, както и към проект № BG16RFPR002-1.014-0015 “Clean Technologies for Sustainable Environment—Water, Waste, Energy for Circular Economy”.

Цитати:

1. D. Elenkova, M. Popova, M. Milanova, *Talanta Open* 2025, **11**, 100434.
2. M. Popova, Y. Dimitrova, K. Lazarova, D. Elenkova, *Pure Appl. Chem.* 2025, DOI: 10.1515/pac-2025-0689.
3. K. Patra, H. Pal, *RSC Sustainability* 2025, **3**, 629–660.
4. G.-D. Kang, Y.-M. Cao, *J. Membr. Sci.* 2014, **463**, 145–165.
5. S. Dutta, W. Mandal, A. V. Desai, S. Fajal, G. K. Dam, S. Mukherjee, S. K. Ghosh, *Mol. Syst. Des. Eng.* 2023, **8**, 1483–1491.

СИНТЕЗ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА НАНОСТРУКТУРИРАНИ СМЕСЕНИ КАЛЦИЕВО-ЦИНКОВИ И КАЛЦИЕВО-МАНГАНОВИ ФОСФАТИ

Александрина Тасева, Надежда Ангелова, Марко Костадинов, Георги Йорданов

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Неорганична химия, бул. „Джеймс Баучер“ 1, 1164 София, България,
abtaseva@uni-sofia.bg*

Наноструктурираният калциев фосфат е обект на научен интерес за разработване на ваксинни адюванти, адсорбенти и материали за тъканно инженерство [1–2]. Калциевият фосфат е нетоксично съединение, естествено присъстващо в организма, което допълнително го прави привлекателен за биомедицински изследвания и приложения. Той бе обект на наши предишни изследвания, при които е установено, че наноструктурираният апатит, както и различни калциево-магнезиеви фосфати, включително магнезиев уитлокит, са ефективни адсорбенти [3].

В настоящата работа са изследвани Zn(II) и Mn(II) като потенциални заместители на Ca(II) в калциевите фосфати. Получени са дисперсии чрез копреципитация от смесени разтвори Ca(II)/Zn(II) и Ca(II)/Mn(II) с динатриев хидрогенфосфат, последвана от термична обработка. Направена е структурна характеристика чрез прахова рентгенова дифракция и сканиращ електронен микроскоп. Получените дисперсии са наблюдавани с оптичен микроскоп.

1. V. Sokolova, M. Epple, *Chem. Eur. J.* 27, 7471 (2021)
2. J.-D. Masson, M. Thibaudon, L. Belec, G. Crepeaux, *Expert Rev. Vaccines* 16, 289 (2017)
3. Angelova N, Koleva S, Kostadinov M, Yordanov G (2022) *Preparation, characterisation and protein adsorption properties of nanostructured magnesium whitlockite*. *J Mater Sci* 57:21571-21582

ПОЛИМЕРНО ИНКЛУЗИВНИ МЕМБРАНИ ЗА ТВЪРДОФАЗНА ЕКСТРАКЦИЯ. ЕФЕКТ НА СЪГЛАСНИ НИШКИ В ПИМ

Калина Великова¹, Тони Спасов¹, Спас Колев^{1,2}

¹ *Faculty of Chemistry and Pharmacy, Sofia University "St. Kl. Ohridski", 1 J. Bourchier Blvd., 1164 Sofia, Bulgaria; mjashkova@uni-sofia.bg (K.V.); tspassov@chem.uni-sofia.bg (T.G.S.)*

² *Department of Chemical Engineering, The University of Melbourne, Parkville, VIC 3010, Australia, s.kolev@unimelb.edu.au (S.D.K.)*

В условията на засилващите се екологични предизвикателствата и нарастващата нужда от устойчиви технологии за третиране на индустриалните отпадъчни води, настоящото изследване разглежда приложението на полимерно инклузивните мембрани (PIMs) за селективна твърдофазна екстракция на йони. Тези мембрани представляват композит, съставен от базов полимер и вграден в полимерната мрежа течен екстрагент, който е селектиран така, че да образува комплекс с екстрахирувания йон. Базовият полимер е структурният компонент на мембраната, осигуряващ нейните механични свойства. По този начин е постигнат устойчив, селективен и рентабилен метод за рециклиране на материали и отстраняване на замърсители от водните басейни в околната среда.

За подобряване на механичните свойства на мембраните бяха успешно синтезирани Полимерно инклузивни мембрани, базирани на PVDF-HFP като основен полимер и Aliquat 336 за екстрагент, с добавени стъклени влакна до 5 wt%. Тяхната микроструктура, както и термичните им и механични свойства бяха характеризирани чрез сканираща електронна микроскопия (SEM), термогравиметричен и диференциално-термичен анализ, както и чрез тест за определяне на якостта на опън и модула на Юнг. Проведени са и експерименти за твърдофазна екстракция с цел сравнение между кинетиката на транспорт на йони през мембрани със и без съдържание на стъклени нишки. Получените резултати показват, че мембраните запазват аморфната си структура при съдържание на стъклени нишки. Също така бе установено, че наличието им подобрява механичните характеристики на мембраните и не пречи на транспорта на йони през мембраната, запазвайки скоростта и ефективността на екстракцията.¹

Резултатите показват, че добавянето на стъклени влакна подобрява приложимостта на полимерно инклузивните мембрани за индустриални цели.

1. Kukoc, L.; Velikova, K.; Perinovic-Jozic, S.; Biocic, M.; Gateshki, M.; Kolev, S.D.; Spassov, T.G. Effect of Glass Fibers on the Mechanical and Transport Properties of Polymer Inclusion Membranes Composed of Aliquat 336 and PVDF-HFP. *Membranes* 2026, 16, 141. <https://doi.org/10.3390/membranes16040141>

СТРУКТУРНИ И ХИМИЧНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ НА ЧАСТИЦИ ОЛОВЕН МОНОСИЛИКАТ И ТЯХНОТО ВЛИЯНИЕ ВЪРХУ ЦИКЛИЧНА УСТОЙЧИВОСТ НА ОЛОВНО-КИСЕЛИННИ БАТЕРИИ

Лилия Стоименова, Албена Александрова, Мария Матракова, Пламен Николов

*Институт по електрохимия и енергийни системи „Акад. Евгени Будевски“
Българска академия на науките
lilia.stoimenova@iees.bas.bg*

Оловните батерии са едни от най-разпространените електрохимични източници на енергия. Намират широко приложение в различни области като съхранение на енергия от възобновяеми източници, резервно захранване, в автомобили с двигатели с вътрешно горене, като спомагателни батерии в хибридни и електрически автомобили и други.

Един от подходите за подобряване на електрическите характеристики на оловните батерии е използването на нови материали като добавки в активните маси на електродите и/или в електролита.

В настоящата работа е изследвана добавка оловен моносиликат $2\text{PbO} \cdot \text{SiO}_2$ в отрицателната електрод и влиянието ѝ върху структурните му характеристики и процесите, протичащи на отрицателната електрод в оловния акумулатор.

Морфологията на добавката и нейното взаимодействие с воден разтвор на H_2SO_4 е изследвано чрез различни аналитични методи и техники като лазерна дифракция, рентгенова дифракция, сканираща електронна микроскопия, трансмисионна електронна микроскопия, рентгенова фотоелектронна спектроскопия, живачна порометрия и определяне на специфична повърхност (БЕТ метод).

Проведени са тестове с 2.0 V лабораторни клетки, с 2 отрицателни и 3 положителни плочи, с номинален капацитет 4.5 Ah. Съгласно протокол EN 50324-6, за оловни батерии за микро-хибридни автомобилни приложения, на всяка клетка са проведени 3 броя начални тестове за определяне на капацитет C_{20} , след което е проведен тест на циклична издръжливост при условия на непълно заредено състояние и 17.5 % дълбочина на разряд.

Получените резултати показват, че изследваното вещество има благоприятен ефект върху електрическите характеристики на отрицателния електрод и може да се използва като добавка в оловната батерия.

ЕЛЕКТРОХИМИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА ВЛИЯНИЕТО НА ЛАНТАНОИДНИ ОКСИДИ ВЪРХУ ОКИСЛИТЕЛНО–РЕДУКЦИОННАТА МИГРАЦИЯ НА НАНОЧАСТИЦИ В КАТОДИ ОТ Li_2RuO_3

Виктор Янев¹, Мартин Недялков¹, Еверина Василева², Петър Цветков¹,
Екатерина Жечева¹, Тони Спасов², Радостина Стоянова¹

¹ *Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките, ул. „Акад. Георги Бончев“, бл. 11, 1113 София, България, vyanev@svr.igic.bas.bg*

² *Факултет по химия и фармация, Софийски университет „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучер №1, София, България*

Въведение: Съвременните литиево-йонни батерии дължат енергийната си плътност предимно на слоестите литиево-преходнометални оксиди, в които и кислородните аниони могат да участват в компенсацията на заряда. Активирането на решетъчния кислород в такъв тип системи може да доведе до разрушаване на кристалната структура. В конкретния случай разглеждаме системата Li_2RuO_3 , при която кислородната активност в комбинация с продължително циклиране е причината за полуверизация и последваща миграция на катодния материал. Отделеният кислород вероятно е причина за създаване на микронапрежения, пропукване и разрушаване на структурата.^[1] Така, при високи потенциали на напрежението, малки частици преминават през сепаратора на електрохимичната клетка.^[2] В настоящата работа изследваме влиянието на Pr_6O_{11} и CeO_2 като кислородни буфери за предотвратяване на електрохимичната миграция и подобряване на цикличната стабилност. Двата оксида се характеризират с изявена кислородна обратимост и притежават каталитична активност.

Експериментална част: За да изясним ролята на модификаторите в обратимото взаимодействие с O_2 и влиянието им върху пулверизацията и цикличната стабилност, използвахме ex-situ XRD, XPS, SEM/EDS и TEM/EDS анализи на електроди и сепаратори. Композитите са изследвани и електрохимично чрез CV, GCPL и EIS.

Резултати: В композитите процесът на пулверизиране се намалява, модификаторите успяват да подобрят цикличната стабилност. Тези фактори допринасят за по-добрите електрохимични характеристики на композитите, сравнени с изходния Li_2RuO_3 .

Цитати:

1 Nedyalkov, Martin, et al. *The Journal of Physical Chemistry C* 129.26 (2025): 11838-11850.

2 Yu, Yang et al, *Chemistry of Materials*, **2019**, vol. 31, 7864–7876

ЦИФРОВИ МЕТОДИ ЗА ПОСТРОЯВАНЕ НА ЕМУЛАТОР НА ПРЕЗАРЕЖДАЕМА БАТЕРИЯ

Димитър Бойчев¹, Благой Бурдин¹, Дария Владикова^{1,2}

¹ *Институт по електрохимия и енергийни системи „Академик Евгени Будевски“, Българска академия на науките, София 1113, ул. „Акад. Георги Бончев“ бл.10, d.boychev@iees.bas.bg*

² *Тракийски университет Стара Загора, гр. Стара Загора 6014, Студентски град, d.vladikova@iees.bas.bg*

Експерименталното развитие на техническата среда, в която работят акумулаторните батерии 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. Зарядният процес от своя страна изисква необходимо време съгласно регламентирано предписание, което по същество предствлява загуба от гледна точка на текущо провеждания експеримент.

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), работна температура 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. От друга страна възможността за промяна на експлоатационните параметри в хода на текущия експеримент придава една допълнителна гъвкавост на изследването.

В настоящата работа е представен иновативен подход за реализация на модул, емулиращ разрядния процес на презареждаема батерия на базата на ПИД регулатор. Процесът на регулиране се осъществява изцяло посредством цифрова обработка на сигнала. За целта е използвана RISK микропроцесорна компютърна конфигурация.

Предимството на разработеният подход е лесна пренастройка на компонентите на регулатора, които са реализирани изцяло по цифров път. В това число времеконстанта на интегриране T_I , времеконстанта на деферинциране T_d и коефициент на пропорционалност K_P . Освен това компонентите на регулатора могат да бъдат пренастройвани и директно в хода на самият експеримент, при необходимост.

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)*, 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**.
3. M. Hamad, A. Kassem, C. Bechara, M. Khatrar, “A PIC-Based Microcontroller Design Laboratory”, ECCE Department, Notre Dame University Louaize, Mikael, Lebanon, 27-29 December 2006, DOI: 10.1109/IWSOC.2006.348266

SELECTIVE SOLVENT EXTRACTION OF Fe(III) USING NOVEL CHELATING LIGANDS: EFFECT OF IONIC LIQUID AND CHLOROFORM MEDIA

Lama Mzek, Maria Atanassova

University of Chemical Technology and Metallurgy, Department of General and Inorganic Chemistry, 8 Kliment Okhridski blvd., 1756 Sofia, Bulgaria, e-mail: mzek@uctm.edu

The solvent extraction of Fe(III) from aqueous solutions was investigated using newly synthesized chelating ligands (HLn, n = 5–8) containing β -dicarbonyl and heterocyclic moieties. The extraction behavior was studied in two different organic media: chloroform (CHCl_3) and the ionic liquid $[\text{C}_1\text{C}_4\text{im}^+][\text{Tf}_2\text{N}^-]$.

The results show that Fe(III) exhibits high extraction efficiency, depending on the ligand structure and the nature of the organic phase. A higher distribution ratio ($\log D$) was obtained in the ionic liquid compared to chloroform, indicating stronger interactions between Fe(III) and the ligand in ionic media. The dependence of $\log D$ on ligand concentration and pH suggests that the extraction process is controlled by both parameters.

Selectivity studies using HL7 toward various metal ions (M^{n+}) reveal a clear preference for Fe(III), while most competing ions show significantly lower extraction. This confirms the important role of both ligand design and solvent nature in achieving efficient and selective extraction.

These results demonstrate that the combination of ionic liquids and tailored chelating ligands provides an effective system for the selective extraction of Fe(III) from aqueous solutions.

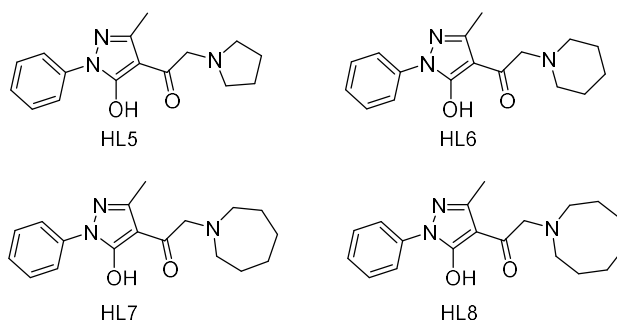


Fig. 1 Chemical structures of chelating extractants, HL5-HL8.

Citations:

1. M. Atanassova, *J. Mol. Liq.* 343, **2021**, 117530.
2. S. Todorova, R. Rusev, Z. Petkova, B. Shivachev, V. Kurteva, *New J. Chem.*, 46, **2022**, 1080-1086.
3. X. Sun, H. Luo, S. Dai, *Chem. Rev.*, 112, 2012, 2100-2128.

Acknowledgment

The research leading to those results received funding from the Bulgarian Science Fund: Grant Agreement № KP-06-H69/5(2022), "Green twist to synergistic solvent extraction and separation of rare earth metals".



СЕКЦИЯ ФИТОХИМИЯ И ФАРМАКОГНОЗИЯ

Мирослав Бояджиев, ФХФ – СУ

Ралица Стоянова, ФХФ – СУ

Траян Груйкин, ФХФ – СУ

ИЗСЛЕДВАНЕ НА МЛАДИ ПРЕДСТАВИТЕЛИ НА *REYNOUTRIA JAPONICA*

Мирослав Бояджиев, Траян Груйкин, Асен Стоянов, Анели Неделчева

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

Reynoutria japonica Houtt. е многогодишно растение, което е широко разпространено в Азия и използвано в традиционната азиатска медицина [1]. В Европа е чужд, инвазивен вид, смятан за един от най-рисковите от екологична гледна точка. Той се разглежда като потенциална суровина поради натрупването на ценни биоактивни съединения [2], но в литературата липсва описание и оценка на натрупването им в младите летораста на растението (*Reynoutria surculi*). Настоящото проучване има за цел да разгледа общото съдържание на антоцианини, неразтворими фибри, протеини, общи феноли и пепел в млади представители на *R. japonica*, както и да се направи микроскопско охарактеризиране на техните диагностични белези. Съставена е карта на находища на вида в България, въз основа на данни събрани от бази данни за гражданска наука. Проби от тези находища са събрани и анализирани следвайки фармакопейни и други методи [3], с които се установява количеството на: антоцианини $0.32 \pm 0.008\%$, неразтворими фибри 29.2 - 55.8%; протеини 3.81%, общи феноли – $3.71 \pm 0.016\%$. Микроскопският анализ открива структури, които не са описани в литературата за този вид – конюгирали устица и вариабилен брой на секреторни клетки в жлезисти трихоми. Получените резултати показват потенциала на младите летораста от *R. japonica* да се разгледат като добър източник на биоактивни съединения. Допълнителни изследвания като определяне на количество на етерични масла и антрахинони са необходими за охарактеризиране на *Reynoutria surculi*, като потенциални суровини за функционални храни.

Екипът изразява благодарности за финансовата подкрепа по проект ФНИ-CV 80-10-213/22.04.2026

1. Wang, Z. J., Trill, J., Tan, L. L., Chang, W. J., Zhang, Y., Willcox, M., Xia, R. Y., Jiang, Y., Moore, M., Liu, J. P., & Hu, X. Y. (2022). *Reynoutria japonica* Houtt for Acute Respiratory Tract Infections in Adults and Children: A Systematic Review. *Frontiers in pharmacology*, 13, 787032. <https://doi.org/10.3389/fphar.2022.787032>
2. Hadzik, J., Choromańska, A., Karolewicz, B., Matkowski, A., Dominiak, M., Złocińska, A., & Nawrot-Hadzik, I. (2023). Oral Wound Healing Potential of *Polygoni Cuspidati Rhizoma et Radix* Decoction-In Vitro Study. *Pharmaceuticals* (Basel, Switzerland), 16(2), 267. <https://doi.org/10.3390/ph16020267>
3. Mukherjee, P. K. (2019). *Quality control and evaluation of herbal drugs: Evaluating natural products and traditional medicine*. Elsevier.

ПИРОЛИЗИДИНОВИ АЛКАЛОИДИ В РАСТИТЕЛНИ ВИДОВЕ ОТ БЪЛГАРИЯ: КАЧЕСТВЕНО И КОЛИЧЕСТВЕНО ОПРЕДЕЛЯНЕ С МЕТИЛОРАНЖ

Ралица Стоянова, Асен Стоянов, Анели Неделчева

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра „Органична химия и фармакогнозия“, бул. „Джеймс Баучер“ № 1, 1164 София,
България, ralica2605@abv.bg

Пироллизидиновите алкалоиди (PAs) представляват вторични метаболити с добре известна хепатотоксичност, синтезирани от представители на ограничен набор растителни семейства (Amaranthaceae, Asteraceae, Boraginaceae, Fabaceae, Orchidaceae, Poaceae и Scrophulariaceae). Поради разпространението им в природата и възможността за контаминация на чайни смеси, мед, мляко и лекарствени продукти, техните растителни вещества и препарати представляват стратегически обекти за изследване във връзка с безопасност и качествен контрол. Цел на настоящото изследване е да се определят растителни видове, натрупващи PAs на територията на България, както и да се разработят и приложат методи за качествено и количествено определяне. Изготвен е преглед на научната литература за биоаккумуляцията на PAs. За локализирането им бяха приготвени микротомни прерези от прясна растителна материя, обагрени диференциално с метилоранж. [1] За количествен анализ алкалоидите бяха екстрахирани и определени спектрофотометрично чрез образуване на комплекс с метилоранж. Пробите бяха анализирани преди и след редукция с цинков прах. От 249 таксона съдържащи PAs, 113 (45%) се срещат на територията на България. PAs бяха детектирани във всички проби. Наблюдавана бе специфична им локализация във вакуоли, проводящи тъкани и полен, което потвърждава вътреклетъчното натрупване, описано в литературата. За *Pulmonaria officinalis* L., herba бе установено увеличение на общото съдържание на алкалоиди от $1.15 \times 10^{-3} \pm 0.04 \times 10^{-3} \%$ до $3.42 \times 10^{-3} \pm 0.19 \times 10^{-3} \%$, след редукция. По данни на авторите това са първите публикувани данни за този таксон. [2] Предложеният аналитичен подход е приложим за първичен скрининг на растителни суровини и може да бъде използван в стратегии за оценка на безопасността на продукти. Предстои разработване и прилагане на допълнителни аналитични методи с цел сравнение на резултатите и получаване на по-точна оценка на съдържанието на пироллизидинови алкалоиди.

Цитати:

- 1 Birecka H, Catalfamo JL, Eisen RN. A sensitive method for detection and quantitative determination of pyrrolizidine alkaloids. *Phytochemistry*. **1981**; 20: 343–344.
- 2 Dobler S, Witte L, Hartmann T. Pyrrolizidine alkaloids in *Pulmonaria obscura*. *Planta*. **2000**; 211: 481–482.

СТЕПЕН НА НАБЪБВАНЕ И МИКРОСКОПСКО ХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА СЛУЗТА ОТ СЕМЕНА НА РАЗЛИЧНИ ВИДОВЕ ЦИТРУСИ

Траян Груйкин, Асен Стоянов, Анели Неделчева

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

Растителните слуги имат множество приложения във фармацевтичните продукти. Те намират приложение като стабилизатори, емулгатори, сгъстители, гелообразуватели и агенти за капсулиране. [1]. Настоящото проучване цели да разгледа физикохимичните и структурните характеристики на слуги от семена на *Citrus reticulata* Blanco, *Citrus maxima* (Burm.) Merr. и *Citrus limon* Osbeck. Индекс на набъбване първоначално бе оценен съгласно Ph. Eur. 12.0, 20804 (01/2008). Той също бе изследван в разтвори на етанол с различни концентрации (10% и 90% V/V), разтвори на NaCl (0,5, 1% и 2% W/W) и при повишена температура (40°C). Микроскопски препарати на напречни прерези на семенна обвивка бяха приготвени в хлоралхидрат (Ph. Eur. 12.0, 20823 (04/2010)), диференциално обагени с муцикармин на Майер [2] и изследвани микроскопски в светло поле с помощта на светлинен микроскоп (Levenhuk MED 35B optical microscope, M2500 Plus camera). Дебелината на слугния слой беше определена (n=50) с LevenhukLite. *C. reticulata* показва най-висок индекс на набъбване ($7.7 \text{ ml} \pm 0.76 \text{ mL}$), в сравнение с този на *C. limon* ($6.7 \pm 0.29 \text{ mL}$) и *C. maxima* ($5.5 \pm 1.5 \text{ mL}$). Набъбването беше понижено в хидроалкохолни системи. Разтворите на електролити не оказаха влияние върху индексите на набъбване. Повишената температура увеличи капацитета на набъбване. Дебелината на слугния слой беше най-голяма при *C. limon* ($117.38 \pm 21.51 \text{ }\mu\text{m}$), последвана от тази на *C. maxima* ($98.30 \pm 15.60 \text{ }\mu\text{m}$) и *C. reticulata* ($86.66 \pm 19.40 \text{ }\mu\text{m}$), разликите бяха статистически значими между групите, съгласно one-way ANOVA и Tukey ($p < 0.05$). Тези резултати показват потенциала на слугните вещества от представители на рода като мултифункционално природно помощно вещество във лекарствени форми.

Цитати:

1. Angelkova V, Stoyanov A. Comparative Investigation of Hydrated Fruits of *Prunella vulgaris* and *Nepetoideae* species. *Planta Med* **2024**; 89(1): 1322
2. Łotocka B. Easy, fast, cheap, informative, and pretty – staining of plant sections with Mayer’s mucicarmin and Lugol’s reagent. *Acta Soc Bot Pol* **2021**; 90: 902

СЕКЦИЯ ОРГАНИЧНА ХИМИЯ

Християна Янчева, ФХФ – СУ

Жени Пеева, ХФ – ПУ

Деница Бъчварова, ХФ – ПУ

Мария Иванова, ФХФ – СУ

Дона Саралиева, ФХФ – СУ

Симона Гочева, ФХФ – СУ

ОЦЕНКА НА СЪДЪРЖАНИЕТО НА МИКРОЕЛЕМЕНТИ В БИОЛОГИЧНА МАТРИЦА КЪРМА

Християна Янчева¹, Милен Богданов², Валентина Любомирова³, Вилияна Митева¹,
Станимира Иванова¹, Петя Христова¹, Илияна Рашева¹

¹ СУ „Св. Климент Охридски, Катедра "Обща и промишлена микробиология", Биологически факултет, пощенски адрес, hvasilevah@uni-sofia.bg

² СУ „Св. Климент Охридски, Катедра "Органична химия и фармакогнозия", Факултет по химия и фармация, пощенски адрес, ohmb@chem.uni-sofia.bg

³ СУ „Св. Климент Охридски, Катедра "Аналитична химия", Факултет по химия и фармация, vlah@chem.uni-sofia.bg

Микроелементите присъстват в минимални количества в човешкото тяло, но са от съществено значение за синтезирането на ензими, хормони и други ключови молекули, от които зависи правилния растеж и развитие на човешкия организъм. В случай на излишък или дефицит, могат да възникнат неблагоприятни последици за здравето. Световната здравна организация разделя микроелементите на задължителни, вероятно от съществено значение и незадължителни (токсични).

Доказано е, че майчината кърма осигурява оптимално хранене за новороденото, но изчерпателни данни за микроелементите в кърмата и тяхната роля за здравето на майката и нейното бебе липсват. Поради тази причина цел на настоящето проучване е получаване на информация за състава на задължителните микроелементи в кърмата на клинично здрави, активно кърмещи българки. Обект на анализ са 34 проби кърма от 17 доброволки в две точки от лактационния период 2-4 и 16-18 седмица от раждането. За анализиране на потенциалните динамични промени в минералното съдържание на кърмата през различните етапи на кърмене е приложен комплексен подход. Пробите са анализирани за 13 задължителни микроелементи чрез ICP-MS метод. Получените резултати показват, че средните стойности на някои от елементите (Zn, Cu, Fe, Mo) са съизмерими с тези, докладвани в литературата; при други (Ca, F, Co, Cr, Se, Mn) са отчетени 2 до 10 пъти завишени нива при българските проби. Наблюдават се и вариации в концентрацията на микроелементите между пробите от различните донори и с напредване на периода на лактация. Тази комплексна картина вероятно се дължи на разлики между етапите на лактация на донора, хранителния прием, добавянето на микроелементи и/или факторите свързани с начина на живот.

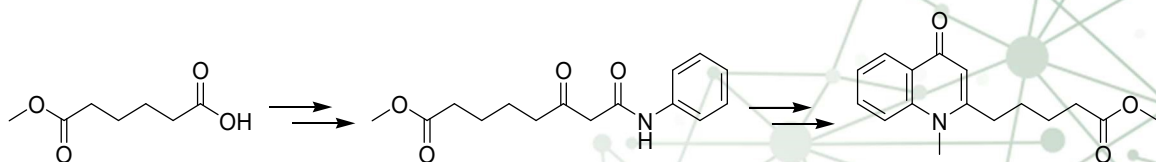
Поради факта, че оптималните диапазони за много микроелементи не са ясно определени, резултатите от това проучване допълват и обогатяват знанията по този въпрос с конкретни данни за съдържанието на микроелементи в кърмата на български кърмещи жени.

Благодарности: Това изследване е финансирано по проект КП-06-Н61/9 от 15.12.2022 г. по проект "Микробиом и състав на кърма: ключови фактори, роля и взаимовръзка с оралната и чревна микробиота на новородени деца", проведен по Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания - 2022г., Фонд „Научни изследвания“ към МОН.

СИНТЕЗ НА ХИНОЛИНОВИЯ АЛКАЛОИД ЕВОЛИОНИН С

Жени Пеева, Пламен Ангелов, Йорданка Сапунджиева

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



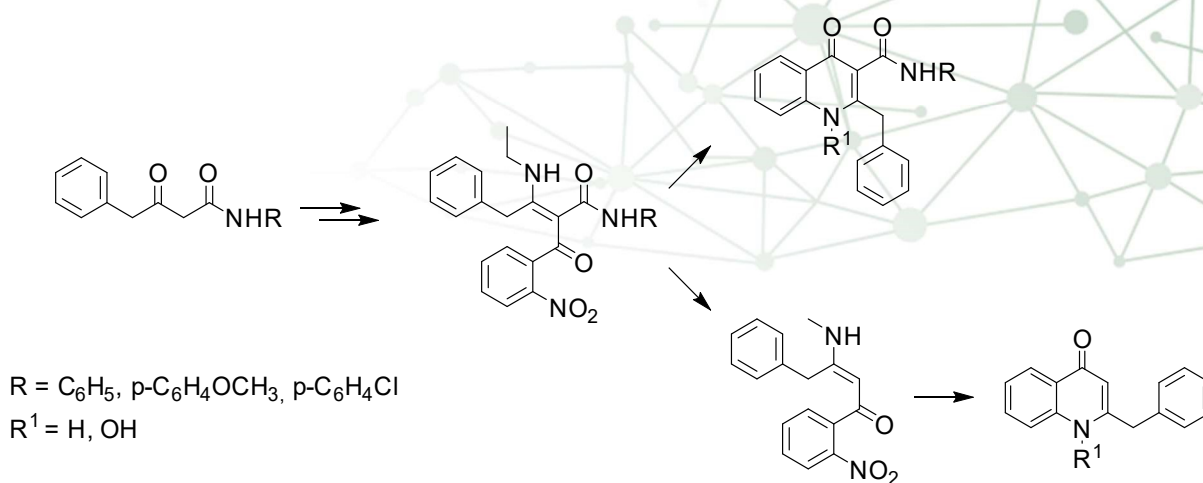
Еволионин С е хинолинов алкалоид от групата на *N*-метил-4-хинолоните, чиято молекула съдържа дълговерижен алкил-естерен остатък, свързан в позиция 2 на хетеропръстена. Алкалоидът е изолиран през 2014 г. от плодовете на *Evodia rutaecarpa* и досега не е бил синтезиран. В този доклад описваме първия тотален синтез на Еволионин С, реализиран по наша оригинална методика, изхождаща от монометилов естер на адипиновата киселина. Ключови етапи в синтеза са получаването на естерно функционализиран бета-кетоамид, последвано от енаминиране с метиламин, ацилиране на получения енаминен интермедиат с нитробензоилхлорид, декарбамоилиране и вътрешномолекулно ароматно куклеофилно заместване на нитрогрупа в последния етап на синтеза. Структурата на получения продукт е потвърдена с обстоен ЯМР анализ (^1H , ^{13}C , COSY, HSQC, HMBC и NOESY).

СИНТЕЗ НА 3-КАРБОКСАМИДНИ АНАЛОЗИ НА БАКТЕРИАЛНИЯ МЕТАБОЛИТ 2-БЕНЗИЛ-4(1H)-ХИНОЛОН

Деница Бъчварова¹, Пламен Ангелов¹, Йорданка Сапунджиева¹, Параскев Недялков²

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

² Медицински университет – София, Фармацевтичен факултет, катедра Фармакогнозия, бул. „Академик Иван Евстратиев Гешов“ №15, София 1431



Приложената синтетична стратегия има за цел въвеждането на функционално разнообразие в страничната верига на хинолоновото ядро. В хода на изследванията върху 2-бензил производните е установено, че етапът на декарбамоилиране на ацилираните междинни продукти води до неочаквана вътрешномолекулна трансформация и образуване на ново кондензирано съединение. Независимо от този страничен процес, подходът се оказва ефективен за синтеза на поредица от нови и неизследвани до момента 3-карбоксамидни аналози на 2-бензил-4(1H)-хинолона, получени чрез триетапна последователност, включваща ацилиране и последваща редукция на нитрогрупата. Тези резултати разкриват нови възможности за структурна модификация и представляват основа за бъдещо търсене на биологично активни вещества.

ПОЛУЧАВАНЕ, СТРУКТУРА И ОПТИЧНИ СВОЙСТВА НА НЯКОИ АРИЛХИНОЛИНОВИ СИСТЕМИ

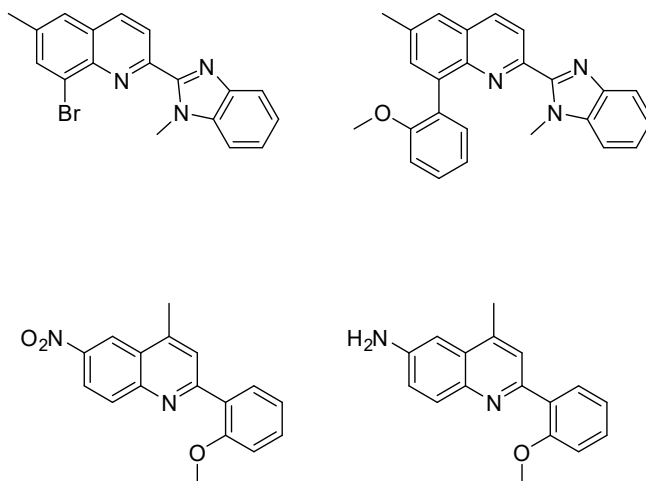
Мария Иванова¹, Йоана Захариева¹, Мартин Цветков¹, Bernd Morgenstern²,
Искра З. Колева¹, Димитър Шандурков¹, Румен Ляпчев¹

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. Дж. Баучер 1, София, България, maria.ivanovaa15@gmail.com

² Department of Inorganic Solid-State Chemistry, Saarland University, 66123 Saarbruecken, Germany

Хинолинови системи, носещи подходящи заместители, проявяват разнообразна биологична активност, например антималярийна, антивирусна, антибактериална и антиракова. Те са и често използвани лиганди в преходнометални комплекси, например в платинови, иридиеви, медни и други.

В настоящето съобщение докладваме синтеза на четири нови хинолинови производни.



Тяхната структура, оптични свойства и сензорен потенциал бяха също изследвани.

Благодарности: Авторите изказват благодарност за финансирането на договор 80-10-6 от 27 март 2026 към СУ „Св. Климент Охридски“.

Цитати:

1. M. Ivanova, J. Zaharieva, M. Tsvetkov, V. Lozanova, B. Morgenstern, R. Lyapchev, *Molbank*, **2024** (3), M1874;
2. R. Lyapchev, M. Ivanova, I. Z. Koleva, D. Shandurkov, *Molbank*, **2026** (3), M2168

СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛНИ ХАРАКТЕРИСТИКИ НА КУМАРИНИ, ПОЛУЧЕНИ ОТ КАТЕХОЛИ ЧРЕЗ РЕАКЦИЯТА НА ПЕХМАН

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

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

Кумарините представляват важен клас бензопирони, широко разпространени в природата като вторични метаболити и притежаващи разнообразни биологични и фотохимични свойства. Благодарение на спрегнатата им π -система и наличието на различни функционални групи, тези съединения намират приложение във фармацията и образната диагностика в медицината. Особен интерес представляват синтетичните подходи за получаването на активирани в бензеновото ядро кумарини, които позволяват моделиране на техните свойства и разширяване на приложенията им.

Настоящите изследвания са насочени към оптимизиране на условия за синтез на кумаринови производни, които съдържат повече хидроксилни, алкокси или алкилови групи в бензеновите ядра. Главният синтетичен подход е основан на реакция на Пехман. В хода на изследването са приложени различни каталитични системи, включително Брьонстедови и Люисови киселини, както и различни условия на провеждане – нагряване и ултразвуково облъчване.

Представените изследвания дават възможност за целенасочено структурно разнообразие на съединения от стилбенев 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 новополучените съединения.

Авторите изказват благодарност на проект № 80-10-64 от 06.04.2026 към СУ „Климент Охридски“ и за финансовата подкрепа на проект BG05SFPR001-3.004-0004-C01 „Интердисциплинарно обучение за развитие на знания и компетентности на докторанти в различни направления на съвременните изследвания за здравословен живот и чисти технологии“ (ИНТЕРДОК), финансиран по процедура „Подкрепа за развитие на проектна докторантура“ на Изпълнителна агенция „Програма за образование“, съфинансиран от Европейския съюз.

ПРИЛОЖЕНИЕ НА 3-АМИНОКУМАРИНИТЕ ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА ШИФОВИ БАЗИ

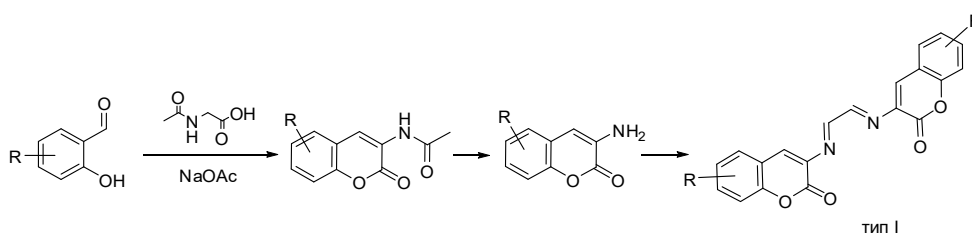
Симона Годева, А. Колева, К. Симеонова, Н. Петкова, Р. Николова

Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
Катедра Органична химия и фармакогнозия, e-mail: moni.godeva1@gmail.com

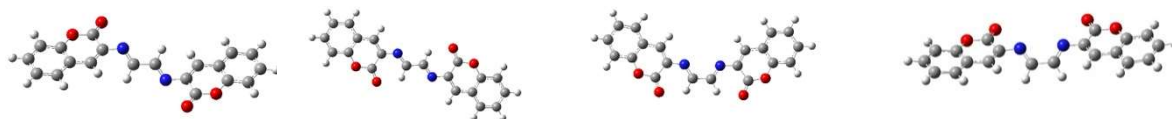
Създаването на нови лекарствени препарати има изключително голямо значение за обществото, както и за развитието на химическата и фармацевтичната индустрия. Пирановата структура се открива в голяма група съединения с богато разнообразие както на представители, така и на фармакологични свойства. Към тази група отнасяме кумарините, 3,4-дихидрокумарините, флаваноидите, бискумарините и техни производни, открити в много лечебни растения.

Производните на 3-аминокумарините имат изключително важна и поливалентна функция, поради което се засилва интересът към синтеза на съединения съдържащи аминкумариновия фрагмент като структурна единица, както и изучаването на потенциалната им биологична, комплексообразувателна и физиологична активност. Сравнително слабо са изучени кумариновите представители на имините, при които амино групата се намира при С-3 в кумариновата система. Част от тези представители също проявяват значителна противоогъбиактивност [1,2].

Представените резултати са свързани с изучаване на възможностите и оптимизиране на условия за получаване на имино производни от тип I.



От съществено значение за свойствата, биологичната активност и способността за комплексообразуване на иминокумарините е пространственото разположение на двете кумаринови ядра около простата линкърна връзка. Възможностите за взаимното им разположение са изучени с помощта на квантовохимични.



Благодарности: Авторите изказват благодарност на проект № 80-10-88 от 07.04.2026 към СУ „Климент Охридски“.

1. Durgapal S.D., Soni R., Soman S.S., Prajapati A.K. *Journal of Molecular Liquids*. **2020**, 297, 111920; D. Ray, A. Nag, A. Jana, D. Goswami, P. *Inorganica Chimica Acta* **2010** 363, 2824–2832; Soni R., Nakum K.J., Katariya K.D., Nada S., Hagar M. *Journal of Molecular Structure* **2024**, 1305, 137778; Yu J., Fan J., Song Y., Zhao Y., Lin Z., Jiang L., Li H. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **2024** 308, 123734
2. Патент CN202510483938A, UNIV XINJIANG AGRICULTURA, **2025**

СЕКЦИЯ ХИМИЧНИ И ФАРМАЦЕВТИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ

Ралица Узунова, ФХФ – СУ

Петър Борисов, ФХФ – СУ

Зорница Зарева, ФХФ – СУ

Максим Димитров, ФХФ – СУ

Христина Мирчева, ФХФ – СУ

Стилиян Колев, ФХФ – СУ

Йордан Съйков, ФХФ – СУ

Цветелина Димитрова, ФХФ – СУ

Мария Миткова, ФХФ – СУ

Станислава Иванова, ФХФ – СУ

Гергана Иванова, ИЕЕС – БАН

ПОВЪРХНОСТНИ И ОБЕМНИ СВОЙСТВА НА СМЕСИ ОТ ЛЕТЛИВИ АМФИФИЛИ И НАТРИЕВ ДОДЕЦИЛ СУЛФАТ

Ралица Узунова^{1,2}, Румяна Станимирова^{1,2}, Красимир Данов^{1,2}, Теодор Гърков¹

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

² CoC “Smart Mechatronics, Eco- and Energy Saving Systems and Technologies”, BG16RFPR002-1.014 0005.

Формулировките в козметиката и в продуктите за почистване представляват смеси от повърхностно активни вещества (ПАВ) и летливи амфифилни молекули (парфюми), които биха могли да променят свойствата на базовите системи. Следователно, изучаването на възможните взаимодействия между летливите молекули и конвенционалните ПАВ е от съществено значение.

В предишни наши изследвания [1,2] са описани адсорбционните свойства на няколко летливи амфифилни молекули – линалол, цитронелол, бензил ацетат, гераниол и ментол. За да се определи количествено степента им на взаимодействие с ПАВ, са измерени изотерми на повърхностното напрежение при различни съотношения на летливата компонента и анионното повърхностно активно вещество натриев додецил сулфат (SDS). Получените експериментални данни са описани с обобщен модел на Ван дер Ваалс за двукомпонентен адсорбционен слой с отчитане на свързването на противойоните в Щерновия слой. В резултат е получена енергията на взаимодействие между адсорбираните амфифилни молекули и тези на SDS.

С помощта на получените физикохимични параметри са изчислени адсорбцията на различните компоненти, степента на запълване на Щерновия слой и повърхностния електростатичен потенциал. Установено е, че смесването на летливите молекули с SDS е както следва: i) за бензил ацетат и цитронелол - антагонизъм; ii) за линалол и гераниол – синергизъм; iii) и смесването с ментол е идеално [3].

Благодарности: Тази научна работа е финансирана от Фонд Научни изследвания, проект: KP-06-H79/4-05.12.2023, и частично финансирана от проект BG16RFPR002-1.014 0005 ЦК „Интелигентни мехатронни, еко- и енергоспестяващи системи и технологии“.

Цитати:

- 1 K.D. Danov, T.D. Gurkov, R.D. Stanimirova, R.I. Uzunova, Kinetics of transfer of volatile amphiphiles (fragrances) from vapors to aqueous drops and vice versa: Interplay of diffusion and barrier mechanisms, *Colloids Surf. A*, 2021, 625, 126931.
- 2 R.I. Uzunova, K.D. Danov, R.D. Stanimirova, T.D. Gurkov, Quantitative characterization of the mass transfer of volatile amphiphiles between vapor and aqueous phases: Experiment vs theory, *JCIS Open*, 2025, 18, 100133.
- 3 R.I. Uzunova, R.D. Stanimirova, K.D. Danov, Interfacial and bulk properties of volatile amphiphiles and sodium dodecyl sulfate mixtures, *Molecules*, 2026, 31, 1256.

РАЗТВОРИ НА ЕСЦИН: ЕФЕКТ ОТ pH И ЕЛЕКТРОЛИТИ ВЪРХУ ТЯХНОТО ПОВЕДЕНИЕ

Петър Борисов, Фатмегюл Мустан, Златина Митринова, Славка Чолакова

Факултет по химия и фармация, Катедра по инженерна химия и фармацевтично инженерство, бул. "Джеймс Баучер" №1, София, pb@lcpe.uni-sofia.bg

Есцинът е тритерпеноиден сапонин, екстрахиран от конски кестен (*Aesculus hippocastanum*). Молекулата му е амфифилна, което води до висока повърхностна активност и формиране на адсорбционни слоеве с нетривиално реологично поведение [1,2]. Съдържа една карбоксилна група, която е нейонизирана при $\text{pH} < 4.7$ и се йонизира при $\text{pH} > 4.7$. Основната цел на настоящото изследване е да се определи как концентрацията на електролит влияе на концентрирани разтвори на есцин (5 тг.% и 10 тг.%) при pH стойности: 4, 6, и 8. Установено е, че при pH 4 есцинът образува агрегати от незаредени мицели, между които възникват водородни връзки. Това взаимодействие води до получаването на мътни разтвори и последващо фазово разделяне [3]. Добавянето на електролит към разтвори при pH 4 не променя вискозитета им, но при pH 6 и 8 електролитът екранира електростатичното отблъскване между заредените мицели и води до частичната им агрегация и желиране на разтворите. С повишаване на концентрацията на електролит, вискозитетът на разтвора преминава през максимум – подобно на поведението, наблюдавано при конвенционалните повърхностно активни вещества (ПАВ). Механизмът зад този ефект, в системите с есцин, е различен. В разтворите на конвенционалните ПАВ, повишаването на вискозитета се дължи на формирането на нишковидни мицели, докато в разтворите на есцин той се дължи на образуването на мрежа от агрегати, които водят до образуването на гелове с прагово напрежение за протичане и еластичност на разтвора. Установено е, че позицията на максимума зависи от типа на използвания електролит. Тези вискозни формулировки са стабилни при минимум 1 месец съхранение на стайна температура и могат да бъдат използвани за козметични формулировки [3].

Благодарности: Тази работа е частично финансирана от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове, проект BG16RFPR002–1.014–0001 “Устойчиво оползотворяване на био-ресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти“.

Цитати:

1. K. Golemanov, S. Tcholakova, N. Denkov, E. Pelan, S. D. Stoyanov, Soft Matter, 2013, 9, 5738.
2. N. Pagureva, S. Tcholakova, K. Golemanov, N. Denkov, E. Pelan, S. D. Stoyanov. Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 491 (2016) 18–28.
3. F. Mustan, P. Borisov, Z. Mittrina, S. Tcholakova, Colloids Surf. A 2026, 737, 139730.

ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ ФАЗОВОТО ПОВЕДЕНИЕ НА ЗАХАРНИ ЕСТЕРИ В РАЗТВОРИ С РАЗЛИЧНИ ПОЛЯРНОСТИ

Зорница Зарева, Петър Борисов, 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, zz@lcpe.uni-sofia.bg*

Захарните естери (ЗЕ) са нейонни повърхностно-активни вещества, получаващи се при естерификация на захароза с мастни киселини. Те са биоразградими и биосъвместими емулгатори без вкус и мирис, използвани в хранително-вкусовата индустрия, както и при формулирането на фармацевтични и козметични продукти. Отскоро се изследват ЗЕ като структуриращи агенти за олеогелове с течни растителни масла като алтернатива на наситените и транс-мазнините. Установено е, че ЗЕ могат да се използват за тази цел, но са необходими високи концентрации $> 10\text{-}20 \text{ wt. } \%$ [1]. За разлика от това, дори ниски концентрации от захарни естери с междинна полярност $\approx 1\text{-}2 \text{ wt. } \%$ във вода могат ефективно да образуват хидрогелове [2].

Целта на настоящето изследване е да разшири изследвания спектър на разтворимост на захарните естери, охарактеризирайки поведението им в системи с междинна полярност, както и да определи критичната концентрация за желиране в тях.

Използвахме ЗЕ S770, получен от захароза и стеаринова киселина (C18), съдържащ около 40% моноестери, ХЛБ = 7. Изследвахме поведението му в тройни смеси на естер + вода + разтворител: глицерол, етилен гликол (EG) или монопропилен гликол (MPG). Охарактеризирахме получените смеси чрез оптична микроскопия, реологични и рН измервания, проведохме DLS анализ, както и проследихме стабилността им във времето.

При системите приготвени с глицерол, най-полярният от изследваните разтворители, не наблюдавахме желиране при нито една от изследваните концентрации на глицерол и концентрации на S770 до 5 wt.%. В системите с EG и MPG наблюдавахме образуването на гелове при начална концентрация на ЗЕ 2 wt. %. За EG, желирането се наблюдаваше между 50 wt. % и 90 wt. % съдържание на EG, докато при MPG интервалът бе по-тесен – от 35 до 65 wt. %.

- 1 Sintang M, Danthine S, Patel A, Rimaux T, Van De Walle D, Dewettinck K: Mixed surfactant systems of sucrose esters and lecithin as a synergistic approach for oil structuring. *J Colloid Interface Sci* **2017**, 504:387–396.
- 2 N. Pagureva, D. Cholakova, Z. Mitrinova, M. Hristova, N. Burdzhiev, S. Tcholakova, Temperature response of sucrose palmitate solutions: Role of ratio between monoesters and diesters, *J. Colloid Interface Sci.* 674 (2024) 209-224.

ИЗСЛЕДВАНЕ НА СТРУКТУРНИТЕ И ФИЗИКОХИМИЧНИТЕ СВОЙСТВА НА ЛЕКАРСТВЕНИ ГЕЛОВЕ С КЕТОПРОФЕН

Максим Димитров¹, Жулиета Вълкова¹, Николай Новачев²,
Захари Винаров¹, Славка Чолакова¹

¹ СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет по химия и фармация, Катедра по Инженерна химия и фармацевтично инженерство, ул. Джеймс Баучер № 1, 1164, гр. София, България, md@lcre.uni-sofia.bg

² Фармацевтична компания Дансон-БГ ООД, отдел „изследване и развитие“, ул. „Отец Паисий“ №26, 2400, гр. Радомир, България

Геловите на основата на Кетопрофен представляват локални нестероидни противовъзпалителни лекарствени форми, предназначени за дермална употреба. Те намират широко приложение при облекчаване на болка, възпаление и оток, свързани с травми, наранявания, контузии, както и повърхностни изгаряния. Благодарение на способността на активното вещество в този лекарствен продукт да прониква през епидермалната бариера, се осигурява бързо достигане до засегнатите тъкани и ефективно локално действие.

Обект на настоящото изследване са дермални гелове, базирани на основата на кетопрофен, които съдържат различна концентрация на гелообразуващ агент. Като целта е да се оцени влиянието на добавката върху физикохимичните свойства на формулировките. В разработените нови формулировки са изследвани ключови параметри, които определят качеството и приложимостта на продукта.

Оценката включва определяне на степента на размазваемост на продукта, оптични наблюдения посредством светлинен микроскоп за проверка за наличие на неразтворени компоненти или кристали в обема на формулировките, измерване на реологичните свойства на разработените формулировки – вискозитет, виско-еластичен отклик и определяне на прагов стрес. Допълнително са проследени показатели като рН, плътност и стабилност във времето. Свойствата на анализирания продукт са сравнени с референтен продукт, който е наличен в търговската аптечна мрежа.

Установено е, че част от разработените формулировки притежават свойства, сравними с тези на референтния продукт. Като концентрацията на гелообразуващия агент е ключов фактор, който оказва съществено влияние върху реологичното поведение на изследваните гелове. Намерени са подходящи условия за разработване на ефективна и стабилна лекарствена форма, подходяща за дермално приложение.

Благодарности: Изследването е финансирано от фармацевтична компания Дансон-БГ ООД, гр. Радомир.

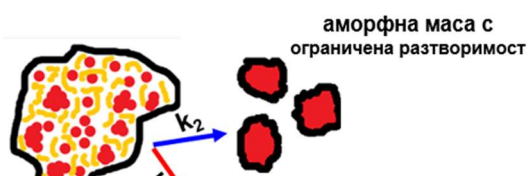
МЕХАНИЗМИ НА РАЗТВАРЯНЕ НА АМОРФНИ ТВЪРДИ ДИСПЕРСИИ

Христина Мирчева¹, Йордан Съйков¹, Нико Холмсток², Ян Бевернаж²,
Сумит Арора², Амрит Паудел², Захари Винаров¹

¹ Катедра Инженерна химия и фармацевтично инженерство, Факултет по химия и фармация, СУ „Свети Климент Охридски“ 1164 София, България, hm@lcpe.uni-sofia.bg

² Janssen Pharmaceutica NV, Beerse, Belgium

Разтварянето на аморфни твърди дисперсии е ключов фактор за оптимална лекарствена абсорбция и бионаличност. Въпреки това, освобождаването на лекарственото вещество често е ограничено до 30–40%, без ясно обяснение на основните фактори и механизми, които контролират този процес. Целта на настоящото проучване е по-задълбочено разбиране на механизмите на разтваряне на аморфни твърди дисперсии и факторите, определящи максималната концентрация на лекарството във водната фаза. Концентрациите на лекарството и полимера бяха определени чрез течна хроматография. Установено беше, че по-високото съдържание на полимер, по-високото рН на средата на разтваряне и подобрените омекрящи свойства, водят до значително по-високи концентрации на лекарството във водната фаза. Моделни експерименти и *in situ* наблюдения на разтварянето показаха, че лекарственото освобождаване се контролира



Фигура 1: Конкуриращи се процеси при лекарствено освобождаване от аморфни твърди дисперсии

наноагрегати

от два конкуриращи се процеса: (1) формиране на наноагрегати с високо съдържание на активното вещество и последващото им освобождаване в обема на разтвора, което води до по-високи концентрации на лекарството, и (2) аморфно-аморфно фазово разделяне, водещо до образуване на големи

аморфни агрегати от лекарството, при които максимално получената концентрация е ограничена от аморфната му разтворимост.

Полученото познание може да бъде използвано при дизайна и разработването на аморфни твърди дисперсии с подобро лекарствено освобождаване.

ВЛИЯНИЕ НА МОЛЕКУЛНАТА МАСА НА ПОЛИМЕРА И СЪСТАВА НА ИЗКУСТВЕНИТЕ ЧРЕВНИ ТЕЧНОСТИ ВЪРХУ СВОЙСТВАТА НА АМОРФНИ ТВЪРДИ ДИСПЕРСИИ

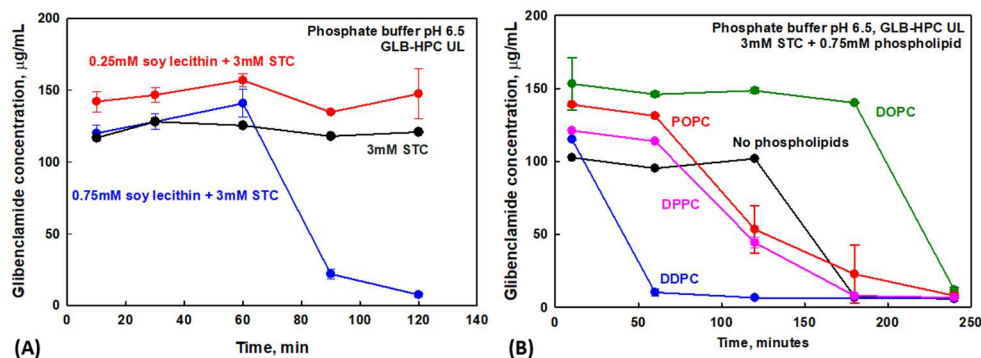
Стилиян Колев, Владимир Петков, Захари Винаров

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

Аморфните твърди дисперсии (ASD) се използват за повишаване на разтворимостта и оралната бионаличност на слабо разтворими лекарства. При разтваряне, те образуват преситени разтвори, които са нестабилни и склонни към кристализация. Изследването има за цел да проучи ефектите на (1) молекулната маса на полимера и (2) състава на чревните течности върху стабилността на преситените разтвори.

Аморфни форми на глибенкламид и хидроксипропилцелулоза (HPC) са получени чрез разпръсквателно сушене и чрез изпаряване от тънки филми. Системите са охарактеризирани структурно чрез оптична микроскопия в поляризирана светлина, диференциално сканираща калориметрия и широкоъгълна рентгенова дифракция. Профилите на разтваряне са изследвани в различни среди, имитиращи чревни течности.

Резултатите показаха, че хидроксипропилцелулозите с по-ниска молекулна маса осигуряват по-добра стабилност на аморфния глибенкламид, в условията на ускорени тестове за стабилност. При разтваряне беше наблюдавано бързо утаяване във FaSSIF среда (таурохолат + лецитин), докато в среда базирана на свинска жлъчка преситените разтвори са стабилни. Моделни експерименти показаха, че жлъчните соли, като натриевия таурохолат (STC) инхибират кристализацията, а присъствието на фосфолипиди предизвика утаяване.



Фигура 1. Профили на разтваряне на аморфни твърди дисперсия на глибенкламид в моделни среди. (А) Черно-3 mM STC; червено – 3 mM STC + 0,25 mM соев лецитин; зелено – 3 mM STC + 0,75 mM соев лецитин. (Б) Черно – 3 mM STC; синьо – 3 mM STC + 0,75 mM DDPC; червено – 3 mM STC + 0,75 mM POPC; розово – 3 mM STC + 0,75 mM DPPC; зелено – 3 mM STC + 0,75 mM DOPC.

СТАБИЛНОСТ НА ПЕПТИДИ В СТОМАШНО-ЧРЕВНИЯ ТРАКТ

Йордан Съйков¹, Кати Амсомс², Лиза Маккуийн², Ян Бевернаж², Кристоф Тристерт²,
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, ucs@lcpe.uni-sofia.bg

² Johnson and Johnson Innovative Medicines

Пептидните лекарства навлизат в терапията на редица заболявания поради висока специфичност и селективност спрямо фармакологичните мишени. Стабилността на пептидите в стомашно-чревните течности е от особено важно значение за оралната им бионаличност. Нашата цел е разработването на процедура, чрез която да се изследва стабилността на пептиди спрямо ензимно разграждане. Изследвани са пет пептида – Семаглутид, Циклоспорин А, Октреотид, Икатибант и Ванкомицин. Изкуствен стомашен сок е приготвен чрез използване на пепсин и солна киселина, а чревните течности съдържат панкреатин от свински панкреас, таурохолат и лецитин. Стабилността и разграждането на пептидите са определени чрез високоефективна течна хроматография. При Циклоспорин А, Октреотид, Икатибант и Ванкомицин, не се наблюдава ензимно разграждане от пепсин или панкреатин. Семаглутид се разгражда много бързо дори при ензимни концентрации по-ниски от физиологичните, както в стомашна, така и в чревна среда. Високата стабилност на повечето от изследваните пептиди се дължи на циклична структура, неестествени аминокиселини, дисулфидни мостове и N-метиране. Подобни модификации не преобладават в структурата на семаглутида, поради което той се разгражда много бързо, по подобие на стандартен протеин. Разработената процедура за изследване на стабилността към ензимно разграждане е приложима за малки количества активни вещества (1-5 мг), подлежи на автоматизация и може да бъде приложена за големи библиотеки от пептиди.

ЕФЕКТ НА pH ВЪРХУ СОЛЮБИЛИЗАЦИЯТА НА АКТИВНИ ВЕЩЕСТВА В ИЗКУСТВЕНИ ЧРЕВНИ ТЕЧНОСТИ

Цветелина Димитрова, Лилия Винарова, Захари Винаров

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

Голяма част от новите активни вещества имат ниска разтворимост във вода, което води до ниска или силно варираща оралната бионаличност. Солюбилизацията на такива активни вещества в човешки чревни течности влияе на оралната им бионаличност и обикновено се изследва чрез *in vitro* измерването на солюбилизацията им в изкуствени чревни течности. В същото време, преобладаващата част от активните вещества могат да се йонизират и съответно да взаимодействат с компонентите на чревните течности (жлъчни соли и фосфолипиди), което да доведе до различна солюбилизацията в зависимост от pH на средата.

В настоящото изследване изследвахме разтворимостта във вода, солюбилизацията и коефициента на разпределение октанол-вода (LogP) на Albendazole (ALB), Glibenclamide (GLIB) и Ibuprofen (IBP) в изкуствени чревни течности при различни pH на средата. Концентрациите на активни вещества при различните експерименти бяха определени посредством високоефективна течна хроматография.

Анализът на данните може да даде информация за ефекта на заряда на активните вещества върху взаимодействията им с мицелите, както и за степента на подобряване на разтворимостта в сравнение с буфер (S_{tot}/S_{buffer}). Установено беше, че докато степента на подобряване на разтворимостта обикновено е най-висока за молекули в незаредена форма, взаимодействията с мицелите зависят силно от заряда на активното вещество. Положително заредените молекули (ALB) взаимодействат по-силно с мицелите, отколкото отрицателно заредената молекула на (GLB). Химична структура обаче също има значение, тъй като някои отрицателно заредени молекули (IBP) също могат да взаимодействат силно с жлъчните соли и фосфолипидите, образувайки смесени мицели. В заключение, електростатичните взаимодействия лекарство-мицела влияят силно на солюбилизацията на активни вещества в чревни течности.

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".

РОЛЯ НА ВИДА НА МАЗНИНТЕ ПРИ ФАРМАКОКИНЕТИЧНИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ХРАНА-ЛЕКАРСТВО

Мария Миткова, Христина Мирчева, 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*

Приемът на храна може да окаже влияние върху фармакокинетиката на перорално приети лекарства. Регулаторните насоки на агенциите по лекарствата на САЩ и ЕС (FDA и EMA) препоръчват използването на стандартизирани режими на хранене, като FDA включва висококалоричен и умерен режим, за да се симулират различни физиологични условия и да се идентифицират силни взаимодействия. Анализът обаче показва, че тези диети не отразяват истинското разнообразие на храната, нито географските и културните особености в храненето. Целта на тази работа е да обобщи състава на храните, използвани в клинични проучвания за ефекта храна-лекарство, както и възможните различия във фармакокинетичните ефекти. В препоръките на регулаторните агенции липсват данни и изисквания за типа мазнини в тестовото меню. Затова, използвайки данни от USDA FoodData Central, направихме анализ на мастнокиселинния състав на компонентите в менютата на FDA/EMA, Япония и Китай. Сравнението показва, че при висококалоричния режим на FDA и EMA преобладават наситени и мононаситени мастни киселини. В Китай основната част са мононенаситените, докато в Япония съдържанието на мазнини е сведено до минимум. Различният мастнокиселинен състав води до промени във физиологията на стомашно-чревния тракт и в солубилизацията на активните вещества, потенциално повлиявайки тяхната фармакокинетика. Проведените анализи и сравнения показват, че не е достатъчно да се уеднакви само калорийният прием; съставът на храната също има значение, за да бъдат резултатите от различни клинични проучвания сравними и представителни за реалния живот и хранене на пациентите.

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".

СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА НА ХИТОЗАНОВИ НАНОВЛАКНА И КОМПЛЕКСИ ХИТОЗАН – СРЕБЪРНИ НАНОЧАСТИЦИ С АНТИБАКТЕРИАЛНО ДЕЙСТВИЕ

Станислава Иванова, Х. Петков, Цв. Сарафска, Т. Спасов

Катедра Приложна неорганична химия, Факултет по химия и фармация, Софийски Университет „Св. Климент Охридски“, 1164, София, nhtsi@chem.uni-sofia.bg

Хитозанът е природен биополимер, получен чрез деацетилиране на хитин, който се характеризира с биосъвместимост, биоразградимост и наличие на реакционноспособни аминогрупи. Благодарение на тези свойства той намира широко приложение в биомедицината, екологията и материалознанието, но сравнително ограничената му антибактериална активност и специфични структурни особености налагат допълнителни модификации за разширяване на функционалността му.

Един от ефективните подходи за повишаване на неговата активност е включването на сребро под формата на наночастици. Среброто притежава изразени антимикробни свойства, а включването му в хитозанова матрица води до синергичен ефект, при който се съчетава стабилизиращата матрица на биополимера с бактерицидното действие на металните наночастици.

Приложен е нов ефективен метод на базата на турбулентен течен поток за получаване на влакнести хитозанови структури с развита специфична повърхност и частично аморфна микроструктура. Увеличаването на скоростта на смесване води до по-висока степен на аморфизация, което повишава реактивността на материала и улеснява редукцията на сребърните йони и формирането на наночастици.

В резултат се формират наночастици от сребро с размери под 150 nm, равномерно разпределени върху повърхността на влакната. Получените хитозан-сребърни композити показват значително по-висока антибактериална активност в сравнение с чистия хитозан, като ефективно инхибират растежа на бактериални щамове като *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus* и *Salmonella enterica*.

Тези резултати очертават широк потенциал за приложение на композита в области като биомедицина, катализа, пречистване на води и разработване на антимикробни покрития.

Цитати:

1. Tsveta Sarafska, Stanislava Ivanova, Milen Gateshki, Galina Sachanska, Orlin D. Velev, Tony Spassov, Filamentous Chitosan Mats by Antisolvent Precipitation in the Regime of Turbulent Liquid Mixing. *Nano Select* **2024**, <https://doi.org/10.1002/nano.70102>

ИНОВАТИВНИ НАНОКОМПОЗИТИ НА ОСНОВАТА НА МОНТМОРИЛОНИТ ЗА ВИСОКОЕФЕКТИВНИ СИСТЕМИ ЗА СЪХРАНЕНИЕ НА ЕНЕРГИЯ

Гергана Иванова, Антония Бакалова, Борислава Младенова

*Институт по електрохимия и енергийни системи „Академик Евгени Будевски“
ул. "Акад. Георги Бончев", бл.10, София, 1113, България,
gergana.ivanova@iees.bas.bg*

Изследването представя синтезиране и охарактеризиране на нови хибридни материали, предназначени за високоефективни суперкондензатори. Основен акцент е поставен върху използването на природни глини като устойчива алтернатива на традиционните електродни матрици. Чрез модифициране на монтморилонит (K10) с функционални добавки е постигната оптимизация на електрохимичните показатели на крайните устройства.

Разработени са многокомпонентни композити, включващи комерсиален активен въглен от биомаса (YP-80F), предварително синтезиран манганов диоксид (MnO_2), чрез метод на утаяване, както и активен въглен, модифициран със сребърни наночастици, също предварително синтезиран. Модифицирането на материалите е осъществено с помощта на ултразвук. Получените хибридни материали са тествани в асиметрични конфигурации. Като електролит и сепаратор е използвана мембрана Aquivion®, импрегнирана с разтвор на натриев сулфат (Na_2SO_4). Всички получени материали са охарактеризирани чрез физикохимични и електрохимични методи.

Разработката демонстрира потенциал за създаване на нискобюджетни, екологично съобразни и устойчиви суперкондензаторни устройства с повишени електрохимични показатели.

Благодарности: Настоящата работа е финансирана от Фонд „Научни изследвания“ към Министерството на образованието и науката по проект № КП-06-M99/2 на тема „Модифицирани електродни материали на основа глина за приложение във високоефективни суперкондензатори.“

СЕКЦИЯ БИОХИМИЯ

Ahmed Uzair Butt, БДУ – Бургас

Ерай Емин, БДУ – Бургас

ENERGY DRINKS: A BIOCHEMICAL AND METABOLIC ANALYSIS

Ahmed Uzair Butt¹, Ventsislav Grigorov², Yordan Georgiev³

¹ *Medical Student at Faculty of Medicine, Prof. Dr. Assen Zlatarov State University of Burgas (AZSUB), 1 Prof. Yakim Yakimov Blvd., 8010 Burgas, Bulgaria, buttuzai_100@outlook.com;*

² *Clinic of Cardiology, Medical Center D-r Staykov - Burgas, 33 Transportna Street., 8008 Burgas, Bulgaria, ventsi.grigorov@gmail.com;*

³ *Department of Chemistry, Biochemistry, Biology and Microbiology, AZSUB, yordan.georgiev@uniburgas.bg*

Energy drink consumption is increasing globally among young healthy individuals. While moderate caffeine intake may have physiological and cardiovascular benefits, excessive consumption of highly formulated energy beverages has been associated with adverse metabolic and cardiovascular events. The underlying biochemical and pathophysiological mechanisms remain poorly understood in a routine clinical assessment. This study aims to evaluate the biochemical composition of energy beverages and examine documented metabolic, pharmacokinetic, and interactive mechanisms that may contribute to systemic dysregulation and acute clinical presentations. The physiological impact of these beverages extends beyond isolated caffeine exposure, reflecting a combined pharmacological matrix. Rapid ingestion may lead to pharmacokinetic stacking, where additional stimulant sources such as a guarana extract contribute to prolonged hepatic CYP1A2 activity. High fructose loads can bypass key regulatory steps in glycolysis, favouring *de novo* hepatic lipogenesis. This metabolic burden is compounded by an "appetite paradox", created by the dual formulation of the heavy stimulant load from caffeine and guarana induces transient anorexia via sympathetic activation. Then, it is followed by severe rebound hyperphagia, driven by the rapid glycemic crash and fructose-induced leptin resistance. The chronic high-fructose burden bypasses normal PFK1 regulatory checkpoints, creating an unregulated carbon flux that could be linked to accelerated tumor proliferation, as well as hyperuricemia, insulin resistance and development of cataracts. Co-ingestion of multiple divalent cations (e.g., Ca^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+}) may result in competitive inhibition at intestinal transporters, reducing overall absorption efficiency. Supraphysiological dosing of certain vitamin B-complex has been associated with adverse effects. The composite formulation of modern energy drinks represents a complex biochemical interaction challenging normal metabolic homeostasis. This multi-system effect has potential clinical relevance in acute metabolic and cardiovascular presentations. Recognition of these interactions may improve clinical assessment of young patients with unexplained physiological disturbances.

Acknowledgements: *The program Academic flight, AZSUB. Assoc. Prof. Dr. Svetlin Tsonev, PhD, MBAL St. Sofia, for the fruitful discussions.*

ПРОМЕНИ В НИВАТА НА СТОМАШНО-ЧРЕВНИ ХОРМОНИ ПРИ АНОРЕКСИЯ НЕРВОЗА

Ерай Емин¹, Марина Янева², Йордан Георгиев^{2*}

¹ *Студент в Медицински факултет, Бургаски държавен университет „Проф. д-р Асен Златаров“, гр. Бургас, България; E-mail: emineray767@gmail.com*

² *Катедра „Химия, биохимия, биология и микробиология“, БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“; marina-yaneva@uniburgas.bg; yordan.georgiev@uniburgas.bg**

Заболяването анорексия нервоза (АН) е сериозно психично, метаболитно и ендокринно нарушение, засягащо множество системи в организма. Значително внимание се обръща на стомашно-чревни (СЧ), невроендокринни хормони и адипокини, които регулират апетита, храносмилането, резорбцията на веществата, чревната перисталтика и енергийния баланс. При пациенти с АН се наблюдава нарушение в нивата на хормони като грелин, лептин, пептид YY (PYY), холецистокинин (ССК), глюкагоноподобен пептид-1 (GLP-1), стомашен инхибиторен пептид (GIP), агути-свързан пептид (AgRP), орексин, меланокортин (MSH) и др. Целта на настоящия обзор е да се анализират и обобщат документираните взаимовръзки между промените в нивата на различни СЧ и други хормони и клиничните симптоми при развитие на АН. Повишените нива на грелин при АН, въпреки ограничения прием на храна, показват адаптивен механизъм за стимулиране на апетита, докато нивата на лептин са намалени поради изчерпване на мастната тъкан. Увеличението на PYY и ССК допринася за преждевременно усещане на ситост и забавяне на стомашната моторика, което води до физически дискомфорт при приема на малко количество храна, затруднявайки храненето и възстановяването на теглото. Нарушените нива на GLP-1 влияят негативно върху секрецията на инсулин и глюкозната хомеостаза. Регулирането на образуването на проопиомеланокортин и функционирането на меланокортиновите рецептори е важно за контролиране на апетита, психоемоционалното състояние и телесното тегло на анорексични пациенти. Редица етеричномаслени компоненти, биофлавоноиди, витамини от В-комплекс, минерали и омега-3 мастни киселини могат да подобрят апетита и храносмилането, да намалят възпалението и стреса при АН. Откриването на нарушения в образуването и клетъчната сигнализация на редица СЧ и други хормони при АН спомага за разработване на ефективни терапии, които да подпомогнат нормализирането на апетита и метаболизма.

Благодарности: Програма Академичен полет на БДУ „Проф. д-р Асен Златаров“.

СЕКЦИЯ
МЕТОДИКА НА ОБУЧЕНИЕТО ПО
ХИМИЯ

Иво Лозанов, ФХФ – СУ

ПРАКТИЧЕСКИ НАСОКИ ПРИ ПРЕПОДАВАНЕТО И ОЦЕНЯВАНЕТО ПО ХИМИЯ В РАМКИТЕ НА МОДУЛ 4. ОТ ВТОРИ ГИМНАЗИАЛЕН ЕТАП

Иво И. Лозанов^{1,2}, Н. Стаменов^{1,2}

¹ СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, ж.к. Лозенец, бул. Джеймс Баучер 1, e-mail: ivoil@uni-sofia.bg

² Национална природоматематическа гимназия „Акад. Любомир Чакалов“, ж.к. Лозенец, ул. Бигла 52

Преподаването на Модул IV. от профилираната подготовка по химия в българското средно училище поставя редица практически предизвикателства пред учителите, свързани основно с баланса между теоретичното учебно съдържание, съпътстващата го експериментална дейност и необходимостта от обективно формиращо оценяване на постиженията на учениците. Настоящият доклад предлага интегриран подход, при който обучението се доближава максимално до реалната аналитична практика чрез съчетаване на класически аналитични методи и съвременни спектроскопски техники. Паралелно са използвани микроексперименти и интерактивни модели с различна степен на нагледност, които подпомагат разбирането на някои абстрактни концепции. Чрез включване на сравнителни експерименти и иновативни учебни задачи се създават условия за формиране на трайни знания и практически умения у учениците. Предложени са някои конкретни стратегии за оптимизиране на процеса на оценяване в условията на ограниченото учебно време за 12. клас. Проучването на мненията на учениците потвърждава тезата, че ефективното обучение по химия не изисква разширяване на учебното съдържание, а неговото по-добро структуриране, осмисляне и педагогически обосновано поднасяне.

СЕКЦИЯ ПОЛИМЕРИ

Марин Симеонов, ФХФ – СУ

Анелия Нейчева, ФХФ – СУ

Николай Петров, ФХФ – СУ

Анна Пранчева, ИП – БАН

СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ПОТЕНЦИАЛ ЗА ДЕРМАЛНО ДОСТАВЯНЕ НА ДЕКСАМЕТАЗОН ЧРЕЗ ХИДРОГЕЛОВЕ НА ВЗАИМНОПРОНИКВАЩИ ПОЛИМЕРНИ МРЕЖИ ОТ (МЕТ)АКРИЛАТНИ ПОЛИМЕРИ

Марин Симеонов¹, Бистра Костова², Росица Михайлова³, Елена Василева¹

¹ Лаборатория по структура и свойства на полимерите, Факултет по химия и фармация, бул. Дж. Баучер 1, София 1164, България; m.simeonov@chem.uni-sofia.bg

² Катедра по Технология на лекарствата и биофармация, Фармацевтичен факултет, Медицински университет-София, ул. Дунав 2, София 1000, България;

³ Катедра по фармакология, фармакотерапия и токсикология, Фармацевтичен факултет, Медицински университет-София, ул. Дунав 2, София 1000, България;

Целта на настоящото изследване е да се проучи потенциалът на хидрогеловите на взаимнопроникващи полимерни мрежи (ВПМ) на основата на поли(2-хидроксиетил метакрилат) (ПХЕМА) и поли(2-диметилакриламид) (ПДМАМ) за дермално доставяне на водонерастворимото лекарствено вещество дексаметазон (DEX).

За постигането на тази цел са получени, чрез последователен метод на синтез, два типа ВПМ – ПХЕМА/ПДМАМ и ПДМАМ/ПХЕМА и с оглед на тяхното приложение са изследвани реологичните им свойства, размера на елементарната клетка на формираните мрежи, капацитета им на набъбване във вода, включително при промяна на температурата и йонната сила на средата. Цитотоксичността на синтезираните ВПМ е изследвана върху HUT-78 и CCL-1 клетъчни линии. Капацитетът и ефективността на натоварване на получените ВПМ са определен при използване на етанолен разтвор на DEX. Профилите на освобождаване на DEX са изследвани в дифузионна клетка при условия, наподобяващи дермално доставяне.

Получените резултати показват, че съставът на ВПМ влияе върху тяхната способност за набъбване във вода, като с увеличаване на количеството ПДМАМ се увеличават и тяхната степен на набъбване, ЕН и КН с DEX. Профилите на освобождаване на DEX от получените ВПМ показват удължено освобождаване чрез дифузионно-контролиран механизъм. В допълнение, ВПМ на ПХЕМА и ПДМАМ не проявяват цитотоксичност към HUT-78 и CCL-1 клетъчни линии. Всички тези резултати демонстрират потенциала на ВПМ на ПХЕМА и ПДМАМ като системи за дермално доставяне на DEX.

Благодарности: Авторите изказват благодарност на програма M-ERA.NET и BNSF за финансовата подкрепа на проект SMARTGEL (КП-06-ДО02/1// 23.07.2024 г.).

ЙОНОГЕЛОВЕ КАТО СИСТЕМИ ЗА ТРАНСДЕРМАЛНО ЛЕКАРСТВЕНО ДОСТАВЯНЕ

Анелия Нейчева, Деница Николова, Елена Василева

*Лаборатория по структура и свойства на полимерите, Факултет по химия и
фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, София 1164, бул. Джеймс Баучер №1,
anelianeysheva@abv.bg*

Полимерните йоногелове са иновативни материали получени при включване на йонна течност в полимерна мрежа. По този начин, те съчетават в себе си механична гъвкавост с висока йонна проводимост. Йоногеловите са обещаващи материали и като трансдермални лекарствени форми, тъй като осигуряват значителна адхезия както и по-добро проникване на лекарственото вещество през кожата, каквито хидрогеловите не притежават. Цвитерйонните полимери, като поли(сулфобетайн меаакрилат) (ПСБ), са особено подходящи за синтезирането на йоногелове поради тяхната висока сол-филност, т.е. способност да абсорбират йони и да взаимодействат с тях. Добавянето на йонни течности в ПСБ мрежи води до значително по-висока механична здравина, в сравнение с техните хидрогелове.

Настоящото изследване се фокусира върху синтеза и охарактеризирането на полимерни йоногелове на ПСБ с използването на две различни йонни течности: 1-етил-3-метилимидазолиев хлорид (ЕМИМ) и 1-бутил-3-метилимидазолиев хлорид (БМИМ), посредством метода на директното смесване. Получените йоногелове бяха натоварени с три различни моделни лекарствени вещества: диклофенак натрий (ДФН), верапамил хидрохлорид (ВПМ) и галантамин хидробромид (ГХБ). С помощта на УВ спектофотометрия бе определена ефективността на натоварване на трите лекарствени вещества. Взаимодействията между лекарствените вещества и ПСБ йоногеловите бяха изследвани с помощта на инфрачервена спектроскопия. Получените нови материали показват потенциал да бъдат използвани като ефективни средства за трансдермално лекарствено доставяне.

Благодарности: Това изследване се осъществява с финансовата подкрепа на Швейцарско-българската изследователска програма (схема за финансиране MAPS) в рамките на втория швейцарски принос към избрани държави членки на ЕС чрез грант № IZ11Z0_230110. Изказваме благодарност и на Министерството на образованието и науката на Република България за финансовата подкрепа.

ПОЛИ(СУЛФОБЕТАИН МЕТАКРИЛАТНИ) ЙОНОГЕЛОВЕ С ВИСОКА ЙОННА ПРОВОДИМОСТ И ТЕРМИЧНА СТАБИЛНОСТ

Николай Петров, Констанс Русева, Елена Василева

Лаборатория по структура и свойства на полимерите, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, бул. Джеймс Баучер, № 1, София, България, nikolaigp96@gmail.com

Полимерните йоногелове (ПЙГ) притежават редица забележителни свойства, които ги правят привлекателни материали за много приложения като гъвкави електрохимични устройства, йонопроводими материали, медицински изделия и системи за доставяне на лекарства. Те имат двуфазна течно-твърда структура, тъй като съдържат слабо летлива йонна течност, имобилизирана в полимерна мрежа. Ключови свойства на ПЙГ са отличната механична стабилност, високата термична и електрохимична стабилност, отличната йонна проводимост, незапалимост и нелетливост. Техните физикохимични свойства могат да бъдат вариани чрез избора на йонна течност или полимер.

Поли(сулфобетаин метакрилатът) (ПСБ) е биосъвместим полимер с цвистерйонна структура, който откликва обратимо на промени в температурата и/или наличието на сол/електролити в околната среда. Поради тази причина, ПЙГ на ПСБ могат да намерят приложение във фармацията и медицината.

Целта на настоящето изследване е да бъдат получени ПЙГ на ПСБ и 1-бутил-3-метилимидазолиев хлорид (БМИМ) и да бъдат охарактеризирани с оглед на бъдещо приложение като високочувствителни електрохимични сензори за диагностика в областта на медицината и/или в батерии.

В рамките на изследването успешно бяха получени полимерни йоногелове на ПСБ, омрежен с поли(етилен гликол) диакрилат чрез УВ иницирирана полимеризация проведена *in situ* в йонната течност БМИМ. Съотношението между мономера сулфобетаин метакрилат (СБМ) и йонната течност БМИМ беше варирано с цел да се определи влиянието му както върху механичната стабилност, така и върху йонната и електро- проводимост на получените ПЙГ. Техният състав беше успешно потвърден с инфрачервена спектроскопия, а термичните им свойства бяха изследвани с диференциална сканираща калориметрия. ПЙГ притежават добра механична стабилност съгласно проведените тестове за изпитване на опън (Tensile Testing). Освен това, те демонстрират електропроводимост, която първоначално нараства с повишаване концентрацията на СБМ до достигане на максимум, след което започва да намалява при по-нататъшното му добавяне. Получените резултати до този момент показват, че ПЙГ имат добър потенциал да бъдат използвани за целите на изследването.

Благодарности: Това изследване се осъществява с финансовата подкрепа на Швейцарско-българската изследователска програма (схема за финансиране MAPS) в рамките на втория швейцарски принос към избрани държави членки на ЕС чрез грант № IZ11Z0_230110. Изказваме благодарност и на Министерството на образованието и науката на Република България за финансовата подкрепа.

ПОЛИМЕРНИ МИЦЕЛИ, НАТОВАРЕНИ СЪС СТИРИЛОВИ БАГРИЛА ЗА ДНК МАРКИРАНЕ И КЛЕТЪЧНА ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

Анна Пранчева¹, Катя Каменова¹, Георги Грънчаров¹, Алексей Василев^{1,2}, Петър Петров¹

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

² *Софийски университет „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер, ж.к. Лозенец, бул. Джеймс Баучър 5, 1164 София*

Органичните флуорофори са основен инструмент в съвременните биоаналитични и визуализационни техники за маркиране и анализ на биологични макромолекули. Сред тях стироловите производни се открояват като перспективни кандидати за биомаркиране и клетъчна визуализация поради интензивното си светлопоглъщане, регулируемите фотофизични свойства и високата чувствителност към промените в околната среда. Въпреки ключовата им роля, много от флуорофорите имат слаба разтворимост във вода, склонност към агрегиране, ограничена фотостабилност и повишена токсичност, което ограничава тяхното приложение. Обещаващ подход за преодоляване на тези недостатъци е включването им в полимерни наноносители, което води до по-добра разтворимост във водна среда и намалена цитотоксичност.

В настоящото изследване са синтезирани две нови стиролови багрила за маркиране на ДНК и клетъчна визуализация. Флуоресцентните багрила са натоварени в полимерни мицели, изградени от амфифилния диблоков съполимер поли(ε-капролактон)-бл-поли(етиленов оксид) (PCL-b-PEO). Хидродинамичният диаметър на частиците е определен чрез динамично разсейване на светлината (DLS). Фотофизичните свойства на флуорофорите преди и след натоварването им в полимерните мицели, както и взаимодействията с ДНК са изследвани чрез UV-Vis абсорбционна и флуоресцентна спектроскопия. Допълнително е оценена цитотоксичността, клетъчното проникване и вътреклетъчната интернализация на получените системи. Установено е, че различния структурен дизайн на двете стиролови багрила има ефект върху локализацията им в мицелните носители и способността им за клетъчно усвояване.

Благодарности: Това изследване е финансирано от Фонд Научни изследвания, Министерство на образованието и науката на България, по проект „Флуорогенни наноструктурирани биосъвместими полимерни материали за анализ на нуклеинови киселини“, КП-06-H89/3-05.12.2024 (PolyFluorNA). Авторите благодарят на проект INFRAMAT за изследователската апаратура, използвана в това изследване.

СЕКЦИЯ АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ

Мила Московска, ФХФ – СУ

Лъчезара Милкова, ФХФ – СУ

Жулиян Желязков, ФХФ – СУ

Виктория Грозданова, ФХФ – СУ

Владислав Михалков, ХФ – ПУ

Калина Михайлова, ФХФ – СУ

ТРАНСФЕР И БИОХИМИЧНО РАЗПРЕДЕЛЕНИЕ НА ПОТЕНЦИАЛНО ТОКСИЧНИ ЕЛЕМЕНТИ В *TARAXACUM OFFICINALE* ОТ АНТРОПОГЕННО ПОВЛИЯНИ ПОЧВИ

Мила Московска, Вероника Михайлова

СУ „Св. Климент Охридски“, катедра „Аналитична химия“, Факултет по химия и фармация, бул. „Джеймс Баучер“ №1, гр. София, пк 1164, mila.moskovska@gmail.com

Настоящото изследване разглежда натрупването и разпределението на потенциално токсични елементи в различни растителни органи (стъбла, листа и цветове) на глухарче (*Taraxacum officinale*), както и техния трансфер от почвата към растението в условията на антропогенно повлияна среда. Проучването е проведено в избрани антропогенно повлияни райони, характеризиращи се с различна степен на индустриално и градско въздействие.

Анализирани са концентрациите на елементите желязо (Fe), манган (Mn), олово (Pb), кадмий (Cd), цинк (Zn), мед (Cu), хром (Cr), никел (Ni), кобалт (Co), арсен (As) и антимон (Sb) в почвени и растителни проби с помощта на масспектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-MS). Оценени са коефициентите на трансфер и акумулация, с цел да се установят закономерности в натрупването и разпределение на елементите в различните растителни части.

Резултатите показват ясно изразена зависимост между нивата на замърсяване в почвата и концентрацията на потенциално токсичните елементи в растенията. Установена е и различна степен на натрупване на анализирани елементи в отделните растителни части.

Получените данни подчертават ролята на глухарчето като биоиндикатор за оценка на замърсяването в урбанизирани територии и предоставят основа за бъдещи екологични и мониторингови изследвания.

ОПРЕДЕЛЯНЕ НА НАТРУПВАНЕТО НА ПОТЕНЦИАЛНО ТОКСИЧНИ ЕЛЕМЕНТИ В СЕДИМЕНТИ НА ЯЗОВИР ПЧЕЛИНА

Лъчезара Милкова¹, Вяра Йотова¹, Ива Беловеждова^{1, 2}, Вероника Михайлова^{1, 2},
Стефан Цаковски¹

¹ Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, гр. София, бул. Джеймс Баучер №1, lachezara.m05@gmail.com

² Център по компетентности „Clean and circle“, СУ „Св. Климент Охридски“, гр. София, бул. Джеймс Баучер №1, ahib@chem.uni-sofia.bg

Настоящото изследване е насочено към оценка на натрупването, химичните форми и екологичния риск от потенциално токсични елементи (ПТЕ) в седиментите на язовир Пчелина. Те представляват важен компонент на водните екосистеми, тъй като функционират както като резервоар, така и като вторичен източник на замърсители. В рамките на проучването са събрани проби от различни точки на язовира, обхващащи зони с различно антропогенно въздействие.

Извършен е ICP-MS анализ за определяне концентрациите на основни ПТЕ, включително олово (Pb), кадмий (Cd), мед (Cu), цинк (Zn) и никел (Ni). Получените резултати са сравнени с фоновы стойности и международни стандарти за качество на седиментите с цел оценка на степента на замърсяване. Направена е последователна екстракционна схема (BCR) на седиментните проби с цел установяване на химичната форма, под която се намират анализиранияте замърсители.

Резултатите показват вариации в концентрациите на изследваните елементи, като в определени зони се наблюдава повишено натрупване. Анализът подчертава необходимостта от редовен мониторинг и прилагане на мерки за управление на качеството на водите и седиментите в язовира.

Изследването допринася за по-доброто разбиране на процесите на натрупване на токсични елементи в седиментите и предоставя научна основа за оценка на екологичното състояние на водните тела в региона.

Настоящият труд е част от проект № КП-06- Н79/3, финансиран от Фонд научни изследвания, проект № BG16RFPR002-1.014-0015 „Чисти технологии за устойчива околна среда – вода, отпадъци, енергия за кръгова икономика“, подкрепен от Европейския фонд за регионално развитие чрез Програма „Научни изследвания, иновации и дигитализация за интелигентна трансформация“ и проект „ИНФРАМАТ“, част от Националната пътна карта за научна инфраструктура, финансиран от ФНИ-МОН.

РАЗРАБОТВАНЕ НА МЕТОД ЗА ЕКСТРАКЦИЯ НА ^{241}Am С ПОМОЩТА НА ДЪЛБОКО ЕВТЕКТИЧНИ СМЕСИ

Жулиян Желязков¹, Гургана Иванова¹, Таня Йорданова¹, Боян Тодоров^{1,2},
Ива Беловеждова^{1,2}

¹ Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски“, гр. София, бул. Джеймс Баучер №1, julian.jeliazkov237@gmail.com

² Център по компетентности „Clean and circle“, СУ „Св. Климент Охридски“, гр. София, бул. Джеймс Баучер №1, ahib@chem.uni-sofia.bg

^{241}Am е трансуренов антропогенен радионуклид с висока радиотоксичност, чието присъствие в околната среда носи риск от натрупване в хранителната верига и налага строг контрол. Пробоподготовката на водни проби за определяне на наличието му в тях представлява сложна и времеемка процедура, често включваща използване на токсични реагенти и генериране на радиоактивни отпадъци. Поради това съвременните изследвания са насочени към разработване на по-екологични и ефективни методи, съобразени с принципите за минимизиране на рисковете, отпадъците, разход на енергия и ограничаване на въздействието върху околната среда.

В рамките на представеното изследване, хидрофобни дълбоко евтектични смеси (ДЕС) са използвани като екстрагенти за течно-течна микроекстракция на ^{241}Am . Получаването им е лесно и бързо, не са летливи, имат висока степен на насищане, голяма част от тях са биоразградими. В качеството на прекурсори са използвани лауринова киселина, ментол, камфор и тимол при различни молни отношения. Резултатите недвусмислено показваха, че най-висока екстракционна ефективност (82 %) е постигната с бинерната смес лауринова киселина:ментол (1:3). Тествани са и различни бустерни добавки, внасяни към ДЕС, с цел да бъдат постигнати максимални добиви. Оптимизацията на екстракционните условия включва основни параметри като рН на средата, време за екстракция, режим на диспергиране (вортекс/ултразвук), температура. В основа на установените оптимални условия е предложен бърз, ефективен и „зелен“ метод за определяне на ^{241}Am във води.

Изследването е част от проект 80-10-47/06.04.2026, финансиран от ФНИ-СУ, проект № BG16RFPR002-1.014-0015 „Чисти технологии за устойчива околна среда – вода, отпадъци, енергия за кръгова икономика“, подкрепен от Европейския фонд за регионално развитие чрез Програма „Научни изследвания, иновации и дигитализация за интелигентна трансформация“ и проект „ИНФРАМАТ“, част от Националната пътна карта за научна инфраструктура, финансиран от ФНИ-МОН.

СМЕСЕНО-ЛИГАНДНИ КОМПЛЕКСИ НА КОБАЛТ(II) С МОНЕНЗИН И АМИНОКИСЕЛИНИ

Виктория Грозданова, Ивайла Панчева

*Софийски университет „Св. Климент Охридски“, катедра Аналитична химия,
бул. „Дж. Баучър“ 1, София 1164, e-mail: viktoria.grozdanova7@gmail.com*

В настоящия доклад е разгледана възможността за образуване на смесено-лигандни метални комплекси, съдържащи полиестерния йонофор Монензин (MonH) и аминокиселина (глицин (GlyH), бета-аланин (β -AlaH), L-пролин (L-ProH)). Предишни изследвания показват, че двузрядните метални йони образуват бис- ($[M(\text{Mon})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$) и моно- ($[M(\text{Mon})]^+$) комплекси в метанолови разтвори. Структурата на бис-частиците е доказана еднозначно чрез рентгенодифракционен анализ на единични кристали. С цел да се установи начина на координиране на йонофора в моно-комплексите, като вторичен лиганд е подбрана аминокиселина (AAH), която при подходящи условия би могла да доведе до получаването на неутрални координационни съединения от типа $[M(\text{Mon})(\text{AA})]$.

Поведението на моно-частицата $[\text{Co}(\text{Mon})^+]$ в присъствието на нарастващи количества депротонирана аминокиселина (Gly, β -Ala, L-Pro) е проследено в метанол чрез електронна спектроскопия (UV-VIS) и кръгов дихроизъм (VIS-CD). Установено е, че при молно отношение $[\text{CoMon}]^+ \text{-AA} = 1\text{-}1$ се образува комплексен вид със състав $[\text{Co}(\text{Mon})(\text{AA})]$, който при съотношения $[\text{CoMon}]^+ \text{-AA} < 1$ координира допълнителни аминокиселинни лиганди. Неутралните комплекси $[\text{Co}(\text{Mon})(\text{AA})]$ с Gly/ β -Ala/L-Pro са изолирани в твърдо състояние и са охарактеризирани с инфрачервена спектроскопия (IR). За целите на сравнителния анализ аналогично изследване е направено с бис-комплексите $[\text{Co}(\text{Mon})_2(\text{H}_2\text{O})]$, $[\text{Co}(\text{Gly})_2]$, $[\text{Co}(\beta\text{-Ala})_2]$ и $[\text{Co}(\text{L-Pro})_2]$.

Настоящата работа е стъпка в изясняването на структурата на новополучените комплекси с различни аналитични методи. Следващата важна крачка е оценка на биологичната активност на координационните съединения и ефекта на включения аминокиселинен лиганд. Бъдещите ни усилия в по-фундаментален аспект ще бъдат насочени към изясняване на връзката структура-биологична активност.

Благодарности: Изследването е осъществено с финансовата подкрепа на Фонд „Научни Изследвания“ (проект КП-06-Австрия/4/2025).

КАЧЕСТВЕН КОНТРОЛ НА ДОМАШЕН САПУНЕН ПРОДУКТ С ЦЕЛ ОПРЕДЕЛЯНЕ НА СЪДЪРЖАНИЕТО НА 1,2,3- ПРОПАНТРИОЛ И АЛКАЛНОСТ

Владислав Михалков, Рая Атанасова, С. Георгиева

*Химикотехнологичен и металургичен университет, Катедра Аналитична химия, ,
София 1756, България, e-mail vladislav.uctm@abv.bg*

Аналитичният проблем, поставен в настоящото изследване, е свързан с количественото определяне на свободния 1,2,3-пропантриол (глицерол) и остатъчната алкалност в домашно приготвен сапун, получен по т.нар. „студен метод“. Определянето на тези параметри е от съществено значение за оценка на качеството на продукта, тъй като глицеролът проявява хидратиращо и омекотяващо действие върху кожата, докато повишената алкалност може да доведе до нежелани дерматологични ефекти. Химикотехнологичното получаване на сапун е също от значение. При протичане на реакцията между естери на висши мастни киселини (триглицериди) с основен хидроксид (натриев хидроксид или калиев хидроксид) се получава сол на висша мастна киселина, която се нарича сапун, като освен нея се отделя и 1,2,3-пропантриол. Протеклата реакция се нарича осапунване. Целта на настоящата работа е разработване и оптимизиране на подход за отделяне и количествено определяне на свободния глицерол от сложната сапунена матрица. За тази цел са изследвани различни варианти на течно-течно екстракционно разделяне чрез промяна на състава на средата и използване на спомагателни реагенти, като ефективността на екстракцията е оценявана чрез анализ на проби с предварително известен състав. Количественото определяне на глицерола е извършено чрез метод на окислително-редукционно титруване, базиран на реакция с калиев перманганат при контролирани условия. Остатъчната алкалност на пробите е определена чрез протолиметрично титруване със стандартен разтвор на силна киселина, което позволява оценка на наличния свободен алкален компонент в системата. Получените резултати дават възможност за оценка на взаимовръзката между съдържанието на глицерол и алкалността като ключови фактори за качеството и безопасността на крайния продукт.

СРАВНИТЕЛЕН АНАЛИЗ НА МАСТНОКИСЕЛИННИЯ ПРОФИЛ НА МЛЕЧНИ ПРОДУКТИ ОТ ЖИВОТИНСКИ И РАСТИТЕЛЕН ПРОИЗХОД ЧРЕЗ GC-FID

Калина Михайлова, Милен Богданов

Софийски Университет, Факултет по химия и фармация,
бул “Дж. Баучер” 1, София 1164, България
e-mail: kdmihaylov@uni-sofia.bg (КМ), mbogdanov@chem.uni-sofia.bg (МБ)

Млечните мазнини се характеризират с изключително сложен мастнокиселинен състав [1], и тъй като прекомерната консумация на определени мастни киселини се свързва с повишен риск от сърдечносъдови и онкологични заболявания [2], изследването на техния профил е от съществено значение за оценката на хранителната стойност на продуктите. Настоящата работа представя сравнителен анализ на мастнокиселинния състав на прясно и кисело мляко от животински и растителен произход, извършен чрез газова хроматография с пламъчно-йонизационен детектор (GC-FID). Резултатите показват, че при пробите от краве мляко преобладават наситените мастни киселини (SFA: $71,8 \pm 1,7$), следвани от мононенаситените (MUFA: $24,8 \pm 1,4$) и полиненаситените (PUFA: $3,4 \pm 0,43$). Домашното краве мляко се отличава с по-високо съдържание на PUFA, включително омега-6 мастни киселини, в сравнение с търговските продукти. За разлика от тях, соевото мляко показва обратна зависимост – SFA: $17,7 \pm 0,52$ / MUFA $10,6 \pm 15,1$ / PUFA: $62,8 \pm 2,11$, доминирана от високо съдържание на PUFA и по-конкретно на линолова киселина. Високата концентрация на PUFA повишава податливостта към липидно окисление и образуване на реактивни кислородни частици, които могат да индуцират клетъчни увреждания и да допринесат за развитието на хронични възпалителни и невродегенеративни процеси [3].

Литература:

1. G. Amores, M. Virto, *Separations.*, 2019, vol. 6, 14.
2. D. Kritchevsky, K. Sundram, *Asia Pacific Journal of Clinical Nutrition.*, 2002, vol. 11, 393.
3. H. Iso., *Stroke.*, 2002, vol. 33, 8.

СЕКЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧНА ХИМИЯ

Никол Георгиева, ФХФ – СУ

Катрин Харалампиева, ФХФ – СУ

Кирила Йовчева, ФХФ – СУ

Велислава Стойчева, МУ – Пловдив

Теодор Диманков, МУ – Пловдив

Павлина Калагларска, МУ – Пловдив

Армина Абдулахи, МУ – Пловдив

Ованес Мурадян, МУ – Пловдив

Гергана Ангелова, МУ – Пловдив

Кристиян Величков, МУ – Пловдив

Константин Дичев, МУ – Пловдив

Ренета Косева, Антония Мазникова, МУ – Пловдив

СИНТЕЗ НА НОВ РЕАГЕНТ ЗА ИЗСЛЕДВАНЕ НА КЛЕТЪЧНИ РЕЦЕПТОРИ

Никол Георгиева, Владимир Гелев

*Софийски университет "Св. Климент Охридски", Факултет по химия и фармация,
Катедра "Фармацевтична и приложна органична химия",
1164 София, бул. "Джеймс Баучер" №1, България,
e-mail: nicolegeorgiev22@gmail.com ohtvg@chem.uni-sofia.bg*

Флуорният ядрено магнитен резонанс е широко използван метод за изследване на конформационните промени на клетъчни рецептори и представлява полезен подход при разработването на нови лекарствени молекули, действащи като антагонисти или агонисти¹.

Използваните в практиката цистеин-реактивни флуор-съдържащи маркери (например BTFMA), притежават едно ограничение, а именно бързата релаксация на сигнала, предизвикана от анизотропията на химично отместване (CSA), вследствие на която се наблюдава ниска резолюция и широки спектрални пикове².

Маркерни молекули съдържащи ^{19}F - ^{13}C двойка, например 5-флуоро- ^{13}C -урацил (5-FU), притежават значително подобрена спектрална резолюция³.

В настоящия доклад е представен синтезът на аналог на 5-FU, способен на реакция с цистеиновите остатъци в протеиновите молекули.

Цитати:

- 1 Gronenborn, Angela M. "Small, but powerful and attractive: ^{19}F in biomolecular NMR." *Structure (London, England : 1993)* vol. 30,1 (2022): 6-14
- 2 11.Ye, L., Larda, S. T., Frank Li, Y. F., Manglik, A. & Prosser, R. S. A comparison of chemical shift sensitivity of trifluoromethyl tags: optimizing resolution in ^{19}F NMR studies of proteins. *J Biomol NMR* 62, 97–103 (2015).
- 3 Boeszoermenyi, Andras et al. "Aromatic ^{19}F - ^{13}C TROSY: a background-free approach to probe biomolecular structure, function, and dynamics." *Nature methods* vol. 16,4 (2019): 333-340

НОВИ ХИНОЛИНИЕВИ СОЛИ, СЪДЪРЖАЩИ ПИПЕРАЗИНОВ ФРАГМЕНТ С НЕОЧАКВАНИ ФОТОФИЗИЧНИ СВОЙСТВА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ДНК

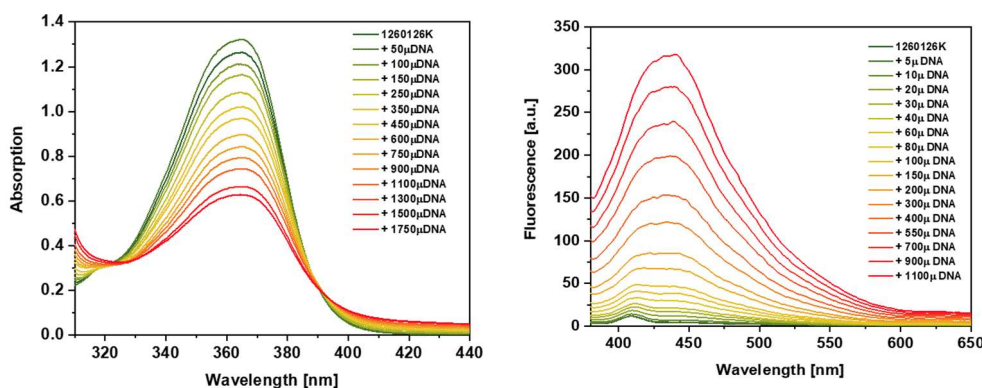
Катрин Харалампиева¹, Диана Чешмеджиева¹, Алексей Василев^{1,2}

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

² Институт по полимери, Българска академия на науките, София 1113, България
e-mail: haralampievakatrin@gmail.com

Хинолиновият скелет е сред най-често използваните фармакофори в лекарствения дизайн поради широкия спектър от биологични активности, характерни за терапевтичните средства и лекарствените кандидати на основата на хинолин. Структурната модификация на хинолиновия скелет позволява преодоляване на резистентността към паразити, модулиране на лизозомната функция и автофагия, както и оптимизиране на фармакокинетичните и токсичните профили, което го прави универсална платформа в съвременната медицинска химия.

Настоящото изследване представя разработването и приложението на нов и екологично щадящ синтетичен подход за получаването на серия аналози на хлорохина. Структурите на новосинтезираните съединения са потвърдени чрез ¹H NMR, ¹³C NMR. Изследвани са и фотофизичните свойства на новосинтезираните хлорохинови аналози с помощта на UV/Vis и флуоресцентна спектроскопия в разтвор, както и при взаимодействието им с ДНК. Целевите съединения демонстрират взаимодействие с двДНК, което ги прави обещаващи химиотерапевтици и показват фотофизични свойства, подходящи за маркиране и визуализиране на нуклеинови киселини.



ИЗГРАЖДАНЕ НА PFAS НАБОР ОТ ДАННИ ЗА МАШИННО ОБУЧЕНИЕ И QSAR МОДЕЛИРАНЕ

Кирила Йовчева¹, Юлия Романова¹, Мирослава Недялкова^{1,2,*}

¹ *Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry and Pharmacy, Sofia University 'St. Kl. Ohridski', Sofia, Bulgaria*

² *Department of Chemistry, University of Fribourg, Fribourg, Switzerland, *miroslava.nedyalkova@unifr.ch*

Пер- и полифлуороалкилните вещества (PFAS) представляват мащабна група от синтетични съединения¹, широко използвани в промишлеността и потребителските стоки. Те са устойчиви на метаболитно и екологично разграждане, което води до трайното им натрупване в околната среда и живите организми. Наскоро PFAS бяха определени като глобална заплаха за планетата и човешкото здраве.² Установена бе причинно-следствената връзка между дълготрайната експозиция на PFAS и риска от развитие на онкологични заболявания и специфични ендокринни нарушения.

Детекцията на PFAS в околната среда представлява сериозен проблем в аналитичната химия. Постоянно се развиват нови и по-ефективни аналитични и спектроскопски подходи, с които да се откриват „вечните химикали“. Друг сериозен научно-изследователски проблем е оценката на токсичността на тези химикали. Затова, тепърва ще бъдат разработвани множество QSAR модели в тази насока. В дигиталната ера решаването на тези два проблема може значително да се ускори чрез наличието на мащабни, надеждни и отворени бази данни за PFAS. От експериментална гледна точка, оформянето на големи по размер набори от PFAS данни е скъпо, трудоемко и бавно осъществимо. Ето защо, ние започнахме създаването на PFAS набор от данни, посредством методите на изчислителната химия. В настоящия доклад представяме концепцията, използваните подходи и текущите резултати за набор от данни, включващ няколкокостотин представители на PFAS.

Цитати:

1. "Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS)". Washington, D.C.: U.S. Environmental Protection Agency (EPA), **2025**; B. Ameduri, *Macromolecules* **2025**, 58, 2781–2791.
2. "The PFAS policy landscape across Europe and beyond: A comparative overview", Health and Environment Alliance (HEAL), **2025**.; B. M. Sharma *et al.*, *Environ. Sci. Technol.* **2026**, 60, 8266–8278.

PYRIDINE-BASED STRUCTURAL MODIFICATIONS IN FLUOXETINE: A DFT AND ADMET STUDY

Velislava Stoycheva¹, Mariana Katsarova^{2,3}, Ivelin Iliev⁴, Svetlana Georgieva⁴,
Vassil Delchev⁵, Nikolay Toshev²

¹ *Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail: velislava1218@gmail.com*

² *Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, mariana.katsarova@mu-plovdiv.bg, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg*

³ *Research Institute at Medical University of Plovdiv, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria*

⁴ *Medical University of Varna, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Chemistry, 84 Tsar Osvoboditel Blvd., Varna, Bulgaria, ivelin.iliev@mu-varna.bg, svetlana.georgieva@mu-varna.bg*

⁵ *Plovdiv University "Paisii Hilendarski", Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, 4000 Plovdiv, Bulgaria, vdelchev@uni-plovdiv.net*

Fluoxetine is a second-generation selective serotonin reuptake inhibitor (SSRI), a widely used FDA-approved drug in the treatment of depression, obsessive-compulsive disorders, and panic disorders. Beyond its primary pharmacological action, fluoxetine interacts with multiple ion channels and receptors, making it a suitable scaffold for structural modification and optimization. The aim of this study is to investigate the effect of systematic heteroatom substitution in the aromatic rings of the fluoxetine molecule by the introduction of nitrogen atoms. For this purpose, two series of derivatives were designed: (a) modification of the trifluoromethyl-substituted ring by substitution of a carbon atom at the second or third position with a nitrogen atom, and (b) modification of the second aromatic ring by introducing nitrogen atoms at the second, third, and fourth positions, converting the benzene ring into a pyridine ring. Quantum chemical calculations were performed using density functional theory at the B3LYP/6-311++G(d,p) level in water (PCM). Global reactivity descriptors were derived from the optimized geometries. Additionally, *in silico* ADMET analysis was carried out to evaluate the pharmacokinetic and drug-like properties of the designed derivatives. These heteroatom-based modifications demonstrate that systematic nitrogen substitution in the aromatic rings of fluoxetine represents a rational strategy for modulating the electronic structure and physicochemical properties of the derivatives.

Acknowledgements: -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 NoD01-98/26.06.2025).

QUANTUM-CHEMICAL AND IN SILICO EVALUATION OF STRUCTURALLY MODIFIED ANALOGUES OF GEPOTIDACIN BY DFT AND ADMET

Teodor Dimankov¹, Maria Vlasheva², Ilyan Dimitrov³, Ivelin Iliev⁴, Svetlana Georgieva⁴, Vassil Delchev⁵, Nikolay Toshev²

¹ Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail: teodor_8b@abv.bg

² Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, mariya.vlasheva@mu-plovdiv.bg, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg

³ Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Medical Biochemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, ilian.dimitrov@mu-plovdiv.bg

⁴ Medical University of Varna, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Chemistry, 84 Tsar Osvoboditel Blvd., Varna, Bulgaria, ivelin.iliev@mu-varna.bg, svetlana.georgieva@mu-varna.bg

⁵ Plovdiv University "Paisii Hilendarski", Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, Plovdiv, Bulgaria, vdelchev@uni-plovdiv.net

Antibiotic resistance is a growing global health problem underlying the need for novel antibacterial agents with different mechanisms of action¹. Gepotidacin, the first triazaacenaphthylene antibiotic, selectively inhibits bacterial type II topoisomerases¹. This drug was approved by the FDA in 2025 for the treatment of uncomplicated urinary tract infections².

The present study aimed to investigate the effect of targeted nitrogen-to-carbon substitutions in different elements of the pharmacophore model of gepotidacin on its global reactivity descriptors, thermodynamic stability, and predicted ADMET characteristics. First, geometry optimizations and frequency calculations were performed using density functional theory (DFT) with the B3LYP functional and the 6-311++G (d,p) basis set in water (PCM). Second, in silico ADMET profiling was carried out using SwissADME to compare the parent molecule and its modified analogues. Global reactivity descriptors and predicted ADMET properties were calculated and comparatively analyzed for gepotidacin and its structurally modified analogues.

These findings demonstrate that even minor structural changes can affect the physicochemical characteristics and pharmacological properties of the studied antibacterial agents, providing a foundation for the rational design of new derivatives with optimized physicochemical and biological properties.

References:

- 1 Watkins, R.; Thapaliya, D.; Lemonovich, T.; Bonomo, R. Gepotidacin: a novel, oral, 'first-in-class' triazaacenaphthylene antibiotic for the treatment of uncomplicated urinary tract infections and urogenital gonorrhoea. *JOURNAL OF ANTIMICROBIAL CHEMOTHERAPY* **2023**, 78 (5), 1137-1142. DOI: 10.1093/jac/dkad060.
- 2 Keam, S. J. Gepotidacin: First Approval: SJ Keam. *Drugs* **2025**, 85 (11), 1479-1485.

Acknowledgements:

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 D01-98/26.06.2025).

PHARMACOPHORE DESIGN OF PROTAC-BASED ANDROGEN RECEPTOR DEGRADERS: INSIGHTS FROM BAVDEGALUTAMIDE

Pavlina Kalaglarska¹, Yordanka Uzunova^{2,3}, Nikolay Toshev²

¹ *Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail: polikalaglarska@gmail.com*

² *Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, yordanka.uzunova@mu-plovdiv.bg, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg*

³ *Research Institute at Medical University of Plovdiv, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria*

Bavdegalutamide (ARV-110) is a nonsteroidal androgen receptor (AR) antagonist that has completed a Phase 1/2 dose-escalation study evaluating the safety and tolerability of ARV-110 in men with metastatic castration-resistant prostate cancer who had progressed on previously approved systemic therapies ¹. Herein, we explore the pharmacophore features of bavdegalutamide-like molecules and their potential adaptation into proteolysis-targeting chimeras (PROTACs), a promising class of therapeutics based on targeted protein degradation².

Based on a literature survey of scientific articles published between 2000 and 2026, our aim was to identify the key elements required for effective AR binding. Our analysis revealed that AR recognition is governed by hydrophobic aromatic regions and hydrogen bond acceptors, which form the core pharmacophore of these molecules. Moreover, incorporation of linker units and E3 ligase-binding moieties transforms these molecules into multifunctional degradation-inducing systems.

The results obtained underline the role of the linker, where its length, flexibility, and chemical composition govern the spatial arrangement between the AR-binding ligand and E3 ligase recruiter.

The proposed pharmacophore model provides a basis for the design of next-generation AR degraders with improved properties in advanced prostate cancer.

References:

- 1 Snyder, L.; Neklesa, T.; Willard, R.; Gordon, D.; Pizzano, J.; Vitale, N.; Robling, K.; Dorso, M.; Moghrabi, W.; Landrette, S.; et al. Preclinical Evaluation of Bavdegalutamide (ARV-110), a Novel PROteolysis TArgeting Chimera Androgen Receptor Degradar. *MOLECULAR CANCER THERAPEUTICS* **2025**, 24 (4), 511-522. DOI: 10.1158/1535-7163.MCT-23-0655.
- 2 Chen, Q.; Munoz, E.; Ashong, D. Insight into Recent Advances in Degrading Androgen Receptor for Castration-Resistant Prostate Cancer. *CANCERS* **2024**, 16 (3). DOI: 10.3390/cancers16030663.

ELECTRONIC STRUCTURE, REACTIVITY, AND PREDICTED BIOLOGICAL ACTIVITY OF HALOGENATED ISATIN-PYRIDINE SCHIFF BASES: A DFT STUDY

Armina Abdollahi¹, Nikolay Toshev², Kaloyan Mihalev³, Ivelin Iliev³, Yordanka Uzunova^{2,5}, Vassil Delchev⁴, Nadya Agova³, Svetlana Georgieva³

¹ *Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vasil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, arminaabdollahi7@gmail.com*

² *Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vasil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, yordanka.uzunova@mu-plovdiv.bg, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg*

³ *Medical University Varna, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Chemistry, 84 Tsar Osoboditel Blvd, Varna, Bulgaria, svetlana.georgieva@mu-varna.bg*

⁴ *Plovdiv University "Paisii Hilendarski", Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, Plovdiv, Bulgaria, vassil.delchev@uni-plovdiv.net*

⁵ *Research Institute at Medical University of Plovdiv, 15A Vasil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria*

Isatin derivatives have emerged at the forefront of pharmaceutical research, exhibiting a wide range of biological activities, including antioxidant, antimicrobial and anticancer activities. In the present study, a series of twelve isatin-pyridine Schiff bases were investigated employing density functional theory (DFT) in order to determine the influence of structural modifications on their electronic properties and reactivity. The molecular series comprised three positional isomers derived from 2-, 3- and 4-aminopyridine, combined with a systematic halogen substitution (-F,-Cl,-Br) at the C6 position of the isatin core. All calculations were performed using the B3LYP/6-311++g(d,p) level of theory, with solvent effects modelled using the Polarizable Continuum Model (PCM). The findings demonstrated that derivatives containing the 2-aminopyridine fragment display the highest occupied molecular orbital (HOMO) energies, lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energies, and smallest energy gaps, indicative of enhanced reactivity and charge-transfer potential. Halogen substitution further modulates these properties, with chlorine and bromine enhancing electrophilicity and electron-accepting ability, while fluorine has minimal influence. DFT analysis reveals that among the investigated structures, the 6-chloro- and 6-bromo-substituted 2-aminopyridine derivatives are the most promising candidates, exhibiting an optimal combination of high electrophilicity, efficient charge-transfer characteristics and favorable electronic stability¹.

References:

1. Toshev, N., Abdollahi, A., Mihalev, K., Iliev, I., Uzunova, Y., Delchev, V., Agova, N. and Georgieva, S., 2026. Electronic structure, reactivity, and predicted biological activity of halogenated isatin-pyridine Schiff bases: a DFT study, *Pharmacia*, 73, pp.1-11.

Acknowledgements: -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 NoD01-98/26.06.2025).

HOW BORON COMPOUNDS BIND AND INHIBIT THE PROTEASOME: A DFT STUDY

Ovanes Muradyan¹, Nikolay Toshev², Iliyan Dimitrov³, Vasil Delchev⁴, Todor Dudev⁵

¹ *Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail: ovanes.m301204@gmail.com*

² *Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg*

³ *Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Medical Biochemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, iliyandimitrov@mu-plovdiv.bg*

⁴ *Plovdiv University "Paisii Hilendarski", Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, Plovdiv, Bulgaria, vdelchev@uni-plovdiv.net*

⁵ *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*

The boron-containing compounds bortezomib and ixazomib are classical proteasome inhibitors approved by the drug authorities, used primarily for the treatment of hematological malignancies. They target the N-terminal threonine residue (Thr1), whose presence is of crucial importance for the proteasomal proteolytic activity. In addition to these, crisaborole, vaborbactam, and tavaborole are FDA-approved boron-based drugs with different structures and therapeutic implications.

This study employed Density Functional Theory (DFT) at the B3LYP/6-311++g(d,p) level of theory combined with the Polarizable Continuum Model (PCM) to study the deprotonation mechanisms of the above-mentioned molecules with Thr1 in different dielectric media (ether, methanol, and water).

We aimed to identify the mechanism and calculate the Gibbs free energy changes associated with key steps in the inhibition mechanism: nucleophilic attack and formation of tetrahedral intermediate complexes, thus shedding more light on their deprotonation modes.

The results from this study contribute to a better understanding of the role of the different structural parts of the inhibitors, binding strength, and reversibility in boron-based proteasome inhibition.

Acknowledgements:

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 D01-98/26.06.2025).

ROMIDEPSIN AND SELENIUM-MODIFIED ANALOGUES AS HDAC INHIBITORS: A COMPUTATIONAL STUDY OF BINDING MODES

Gergana Angelova¹, Nikolay Toshev², Yordanka Uzunova^{2,4}, Diana Cheshmedzhieva³,
Todor Dudev³

¹ *Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail: gergana.ang6@gmail.com*

² *Medical University of 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*

⁴ *Research Institute at Medical University of Plovdiv, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria*

Histone deacetylase inhibitors (HDACi) represent an important class that exerts its antitumor effect by binding to the Zn^{2+} ion in the active site of histone deacetylase enzymes (HDACs). Romidepsin is an FDA-approved HDAC inhibitor (2009) used in the treatment of cutaneous T-cell lymphoma (CTCL) and peripheral T-cell lymphoma (PTCL). From a chemical point of view, romidepsin is a cyclic tetrapeptide that exhibits a unique mechanism of action, in which its intramolecular disulfide bridge undergoes intracellular reduction to generate a thiol group. Then, it acts as a prodrug with a thiol species capable of coordinating the catalytic Zn^{2+} ion in the enzyme active site.

In the present study, romidepsin and three selenium-modified analogues, obtained through systematic substitution of sulfur atoms within the disulfide bridge, were investigated. The aim of this study is to evaluate the thermodynamic preference between the oxidized cyclic and the reduced metal-binding form, as well as the influence of chalcogen substitution on zinc coordination. The research was performed through the methods of density functional theory (DFT) with polarizable continuum model computations (PCM) in order to address the above-mentioned scientific questions.

Acknowledgements:

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 D01-98/26.06.2025).

METAL AFFINITY AND SELECTIVITY OF BENZAMIDE-BASED HISTONE DEACETYLASE INHIBITORS

Kristiyan Velichkov¹, Armina Abdollahi¹, Nikolay Toshev², Yordanka Uzunova^{2,4},
Diana Cheshmedzhieva³, Todor Dudev³

¹ *Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail:kristiyan.velichkov4@gmail.com*

² *Medical University of 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, t.dudev@chem.uni-sofia.bg, dvalentinova@gmail.com*

⁴ *Research Institute at Medical University of Plovdiv, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria*

Histone deacetylase inhibitors (HDACi) have demonstrated increasing potential by inhibiting the activity of histone deacetylase enzymes (HDACs). Benzamide-based HDAC inhibitors (BBHDACi), including Chidamide, Entinostat, Mocetinostat, and Zabadinostat, share a conserved o-aminoanilide moiety that binds to the catalytic Zn²⁺ ion in the HDAC enzyme active site.

This work addresses key questions regarding the molecular factors governing metal affinity/selectivity of the selected BBHDACi towards different biologically relevant divalent cations (Zn²⁺, Mg²⁺, Fe²⁺, Co²⁺, and Ni²⁺).

First, how do the structural factors influence affinity/selectivity toward these metal ions? Second, what is the preferred binding mode of the selected BBHDACi to these metal ions?

The research employed Density Functional Theory calculations at the B3LYP/6-311++g(d,p) level of theory and Polarizable Continuum Model (PCM) computations in water and methanol to study the physicochemical properties of the selected BBHDACi.

Moreover, this study extends our previous investigations of Zn²⁺ affinity by establishing a hierarchy of metal ion preference for BBHDACi and provides molecular-level insight into the processes governing metal selectivity in HDAC inhibition.

Acknowledgements: *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 D01-98/26.06.2025).*

REPURPOSING OF HISTONE DEACETYLASE INHIBITORS FOR LEISHMANIASIS TREATMENT: FROM ONCOLOGY TO ANTIPARASITIC THERAPY

Konstantin Dichev¹, Yordanka Uzunova², Krasimira Eneva³, Svetlana Georgieva⁴,
Todor Dudev⁵, Diana Cheshmedzhieva⁵, Darinka Dimitrova⁶, Gergana Angelova¹,
Ilyan Dimitrov⁷, Nikolay Toshev²

- ¹ Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail: konstantindichev5@gmail.com, gergana.ang6@gmail.com
- ² Medical University of 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 Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, Department of Infectious Diseases, Parasitology and Tropical Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, krasimira.eneva@mu-plovdiv.bg
- ⁴ Medical University of Varna, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Chemistry, 84 Tsar Osvoboditel Blvd., Varna, Bulgaria, svetlana.georgieva@mu-varna.bg
- ⁵ 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, dvalentinova@gmail.com
- ⁶ Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, Department of Pharmacology and Clinical Pharmacology, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, darinka.dimitrova@mu-plovdiv.bg
- ⁷ Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Medical Biochemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, ilian.dimitrov@mu-plovdiv.bg

Leishmaniasis is a neglected tropical disease (NTD) caused by the protozoan parasites of the genus *Leishmania*. *Leishmania* spp. consist of 20 different species of single-cell eukaryotic organisms that have two morphological forms: promastigote form that is the infectious form and amastigote form that is the pathogenic form causing Leishmaniasis. The disease has three possible clinical forms: visceral, cutaneous and mucocutaneous. These parasites have histone deacetylase enzymes that are present in the human body as well and are responsible for the condensation of chromatin and lowering the expression of certain genes. The inhibition of HDACs causes increased gene expression, cell cycle arrest and apoptosis in targeted cells. They are either Zn^{2+} dependent or NAD^+ dependent.

The current treatment of Leishmaniasis demands the long-term use of toxic drugs with a high chance of developing resistance. Currently there are several FDA-approved molecules from different classes that inhibit the HDACs and are used in oncology as anticancer drugs. Due to their well-studied mechanism of action, HDACi have attracted interest beyond oncology. In *Leishmania*, HDAC homologues have attracted scientific interest as an alternative treatment for Leishmaniasis. This assumption is based on the structural differences between the human HDACs and parasitic HDACs that can be exploited for the development of a molecule that can be both active and selective toward the parasites.

The aim of this literature review is to systematically analyze and classify HDACi investigated in the context of Leishmaniasis, focusing on the relationship between their chemical nature and their activity against parasitic HDACs. Furthermore, this study is focused on identifying structural features and chemical classes of HDACi that can serve as a basis for the design of novel antiparasitic agents.

COMPUTATIONAL INSIGHTS INTO THE BINDING MODE OF THIAZOLIDINEDIONE-BASED INHIBITORS IN THE HDAC ACTIVE SITE

Reneta Koseva¹, Antonia Maznikova¹, Nikolay Toshev², Vassil Delchev³, Stela Dimitrova^{2,4}, Diana Cheshmedzhieva⁵, Todor Dudev⁵

¹ Medical University of Plovdiv, Faculty of Medicine, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, e-mail: renikiseva@gmail.com, antonia.mv@gmail.com

² Medical University of Plovdiv, Faculty of Pharmacy, Department of Bioorganic Chemistry, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria, stela.dimitrova@mu-plovdiv.bg, nikolay.toshev@mu-plovdiv.bg

³ Plovdiv University "Paisii Hilendarski", Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, 4000 Plovdiv, Bulgaria, vdelchev@uni-plovdiv.net

⁴ Research Institute at Medical University of Plovdiv, 15A Vassil Aprilov Blvd., Plovdiv, Bulgaria

⁵ 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, dvalentinova@gmail.com

Histone deacetylases (HDACs) are zinc-dependent enzymes that regulate chromatin structure and gene expression, making them drug targets in anticancer therapy. In the last twenty years, their inhibitors have received considerable attention, with approved drugs belonging to hydroxamate and benzamide classes. However, the search for novel molecules continues, among which thiazolidinedione derivatives (TZDs) have emerged, displaying promising anticancer potential and the ability to coordinate Zn^{2+} in the enzyme active site. Despite this, their precise binding mechanism remains unclear, posing many scientific questions regarding its effective application in drug development.

In this study, the binding mechanism of TZD-based inhibitors was investigated using density functional theory (DFT) calculations at the B3LYP/6-311++g (d,p) level of theory. A series of compounds, including the parent TZD scaffold, a reference derivative, Pioglitazone (PGL), and modified TZD-based warheads, were examined. Zinc coordination was modeled in both a simplified aqueous model system and in a model of an enzyme active site containing one histidine and two aspartate residues, representing the first coordination sphere of the HDAC enzyme. These findings provide valuable insights into the zinc-binding mechanism of TZD-based HDAC inhibitors and establish a basis for the rational design of new derivatives with improved properties.

Acknowledgements: 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 D01-98/26.06.2025).

XXIV НАЦИОНАЛНА КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИЯ ЗА СТУДЕНТИ И ДОКТОРАНТИ

20-22 май 2026 г. София

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

