

*Научна конференция
за студенти и докторанти*

„ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА В ХИМИЯТА“

Пловдив, 2014

Научната конференция за студенти и докторанти „Предизвикателства в химията“ се организира от Химически факултет и Студентски съвет на Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“.

Този форум има за цел да предостави поле за изява на млади учени, занимаващи се с проблеми от различни направления в областта на Химията. Участието на студенти и докторанти от други университети от град Пловдив и страната е предпоставка за създаване на добри работни контакти за младите учени, плодотворна среда за обмяна на знания, умения и опит.

СЪДЪРЖАНИЕ

Комитети	8
----------------	---

СЕКЦИЯ „ОРГАНИЧНА ХИМИЯ“ И „БИОХИМИЯ“

И. Парушев, И. Иванов, В. Христов

<i>Конкурентни реакции на електрофилна циклизация на 1,3-бифункционализирани алени</i>	11
--	----

И. Исмаилов, И. Иванов, В. Христов

<i>Синтез и реакции на циклоизомеризация на фосфорилирани α-хидроксиалени</i>	12
---	----

Х. Хасанов, И. Иванов, В. Христов

<i>Насочен синтез и региоселективни циклизации на 4-хидрокси-1,3,4-трифенилаленил фосфонат и фосфин оксид</i>	13
---	----

Е. Петрова, М. Дочева, Ст. Статкова-Абегхе

<i>Изследване на радикал-улавяща активност на растителни екстракти с приложение в медицинската практика</i>	14
---	----

Ст. Статкова-Абегхе, Й. Стремски, С. Гандова

<i>Синтез на нови бензотиазолови производни</i>	16
---	----

П. Иванова, Я. Вълев, Л. Колева

<i>Протеазна модификация на слънчогледови белтъци</i>	17
---	----

Д. Христов, С. Николова

<i>Логиката на химичния синтез</i>	18
--	----

СЕКЦИЯ „АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ“ И „НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ“

А. К. Тенева и А. К. Дечева

<i>Изследване оцветяването на археологични стъкла (внос и местно производство от XI – XIII в.), открити в средновековния некропол в Шипотско (Банско)</i>	21
---	----

Ц. Лазарова, Д. Ковачева <i>Нови методи за получаване на наноразмерни материали</i>	22
Т. Стефанова, К. Томова, К. Гавазов <i>Екстракционно-спектрофотометрични изследвания на тройни комплекси на ванадий (V) С 4-(2-тиазолилазо) орцинол и тетразолиеви соли</i>	23
К. Бърдаров, М. Найденов, К. Амирова, Р. Джингова <i>Бърз и надежден метод за определяне на апо-фитохелатини (GSH, PC2-PC5) в растения посредством CORE-SHELL HPLC-MS</i>	24
С. Чакърва, Г. Генчева <i>Нови платинови комплекси на 2-аминопиридин и 4-аминопиридин – получаване и спектрално охарактеризиране</i>	26
С. Асанова, А. Ахмедова, П. Маринова <i>Смесенолигандни комплекси на рутений с терпиридин и 2,4-дитиохидантоини</i>	27
Д. Чакърва-Димитрова, В. Кметов <i>Нов метод за индиректно определяне на активно вещество във фунгицида цинеб чрез ICP-OES измерване на сярата</i>	28

СЕКЦИЯ „ФИЗИКОХИМИЯ“ И „ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ“

Н. Стоева, И. Спасова, Р. Николов, М. Христова <i>Нанокмпозитни SiO₂/C материали – получаване и приложение</i>	31
В. Иванова, С. Трънкова, Ст. Христоскова, М. Стоянова <i>Хетерогенно-каталитично окисление на кисело оранжево 7 багрило с участие на CO₃O₄-Vl₂O₃ композитни материали</i>	32

П. Кънчева, В. Делчев

Теоретично изследване на механизмите на фотоиндуцирана циклодимеризация на цитозина и 2,4-диаминопиримидина през конични сечения S_1/S_0 33

СЕКЦИЯ „ХИМИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ“

И. Костова, Т. Пашова

Синтез и изследване на оптичноактивни стъклокерамични материали 37

Т. Овчарова, Г. Антова, Т. Ненкова

Съдържание на алкохол в спиртни напитки 38

Н. Петкова, П. Денев

Химична и ензимна модификация на инулин и фруктоолигозахариди 39

Н. Солаков

Създаване на технология за производство на серум за трансдермално прилагане, предназначен за възстановяване на екстрацелуларния матрикс на кожата при човека 40

ПОСТЕРНА СЕСИЯ

И. Парушев, И. Иванов, В. Христов

Конкурентна електрофилна циклизация и присъединителни реакции на 4-фосфорилирани аленкарбоксилати 43

И. Исмаилов, И. Иванов, В. Христов

Електрофилни реакции на фосфорилирани А-хидроксиалени 44

Х. Хасанов, И. Иванов, В. Христов

Електрофилна циклизация и реакции на присъединяване на 3-винилаленил фосфин оксид 45

Р. Грудева, Н. Петкова, П. Денев*Нови подходи при синтеза**на биологично активни сукроестери 46***Й. Стремски, Д. Георгиев, Д. Киркова, С. Статкова-Абегхе***Синтез и антимикробна активност на нови циклични**кетони получени при реакция на алфа амидоалкилиране 47***S. Dagnon, D. Vojilov, A. Ustichkov, K. Koev, I. Dincheva***Comparative characterization of essential oil and polyphenols**in mentha piperita, mentha citrata and mentha suaveolens 49***Н. Кочев, С. Аврамова, Н. Желязкова***Компютърно представяне на химични реакции**и труктурни трансформации с Ambient-SMIRKS.**Приложения при предсказване на метаболити 50***V. Paskaleva, N. Kochev, O. Pukalov, N. Jeliazkova***Exploratory data analysis on QSAR/QSPR modeling**and tautomerism 53***М. Шипочка, Л. Димитров, И. Стамболова,****К. Миленовар В. Блъсков, Д. Стоянова, А. Елиаз***Хидротермално активиран ZnO за фотокаталитично**обезцветяване на замърсена с текстилно багрило вода 55***Е. Коленцова и Д. Димитров***Влияние състава на катализаторния комплекс върху**каталитичната активност на си-тп-сг смесени оксиди 56***А. Гъзова, И. Кръстев, Л. Петков и Ц. Доброволска***Самоорганизация при електроотлагане**на двойни сплави от сребро, калай и антимон 57***К. Йосифов, Л. Петков***Изследване на процеса на електрохимично**получаване на натриев хипохлорит 58*

К. Бърдаров, М. Найденов, К. Амирова, Р. Джингова <i>Скрининг на фитохелатини и изо-фитохелатини в <i>Clinopodium Vulgare</i> L. В резултат на стрес с Cd, Cu, Zn и Pb: в търсене на нови форми</i>	59
С. Генова, М. Казакова, Я. Феодорова, М. Маринов, В. Сарафян, Н. Стоянов, П. Маринова <i>Синтез и антипролиферативно действие на 1,3-дихидроксиметил-(9'-флуорен)-спиро-5-хидантоин и неговия Cu(II) комплекс в <i>in vitro</i> условия.....</i>	61
Н. Дерменджиева, Е. Разказова-Велкова, В. Бешков <i>Каталитично и некаталитично окисление на сулфидни йони от моделни разтвори на морска вода</i>	63
С. Стефанов, Д. Миленкова, В. Бешков <i>Енергийни параметри на горивна клетка на базата на окисление на сулфидни йони</i>	64
Д. Миленкова, Д. Янков <i>Фазово равновесие в двуфазни водни системи ВUОН – K_2HPO_4/KH_2PO_4.....</i>	65
АЗБУЧЕН ПОКАЗАЛЕЦ.....	66
ЗА ХИМИЧЕСКИЯ ФАКУЛТЕТ.....	67

КОМИТЕТИ

Организационен комитет

Председател

доц. д-р **Стоянка Николова** тел. 349 tanya@uni-plovdiv.bg

Членове:

д-р **Олга Тенева** тел. 390 olga.teneva @ abv.bg

д-р **Кирила Стойнова** тел. 430 stoynova @ uni-plovdiv.bg

ас. **Станимир Манолов** тел. 349 manolov@uni-plovdiv.net

ас. **Стефка Начкова** тел. 204 stefka@uni-plovdiv.net

ас. **Димитър Божилов** тел. 397 bozhilov@uni-plovdiv.bg

докторант **Ванина Иванова**

докторант **Павлина Кънчева**

докторант **Теодора Стефанова**

студент **Александър Устичков**

Научен комитет

доц. д-р **Стела Статкова-Абегхе** тел. 349 stab@uni-plovdiv.bg

доц. д-р **Кирил Гавазов** тел. 420 kgavazov@uni-plovdiv.bg

доц. д-р **Веселин Кметов** тел. 337 kmetov@uni-plovdiv.bg

доц. д-р **Николай Кочев** тел. 447 nick@uni-plovdiv.bg

доц. д-р **Нина Димчева** тел. 336 ninadd@uni-plovdiv.bg

доц. д-р **Гинка Антова** тел. 290 ginant@uni-plovdiv.bg

доц. д-р **Йорданка Димова** тел. 230 dimova@uni-plovdiv.bg

доц. д-р **Боян Боянов** тел. 412 boyanb@uni-plovdiv.bg

* *Всички телефони се набират автоматично с код 261 и вътрешен номер*

**СЕКЦИЯ „ОРГАНИЧНА ХИМИЯ“
И
„БИОХИМИЯ“**

Председател: доц. д-р Стела Статкова

КОНКУРЕНТНИ РЕАКЦИИ НА ЕЛЕКТРОФИЛНА ЦИКЛИЗАЦИЯ НА 1,3-БИФУНКЦИОНАЛИЗИРАНИ АЛЕНИ

И. Парушев, И. Иванов, В. Христов

Шуменски университет „Епископ К. Преславски“,
Факултет по природни науки, Катедра по органична химия и технология,
9700 Шумен, ул. Университетска 115, E-mail: parushev.chem@abv.bg

Изследванията в настоящата разработка имат научно-приложен характер. Те са насочени към създаване на лесно достъпни и селективни методи за синтез на 1,3-бифункционализирани алени и изследване на техните електрофилни реакции с оглед проучване възможностите и ограниченията за протичане на циклизация. За целта ние създадохме нови методи за получаване на 4-функционализирани аленкарбоксилати от 2-хидрокси-алк-3-иноати [1]. Показано е, че халогенирането, сулфанилирането и селанилирането на 4-сулфинилирани аленкарбоксилати [2] протича с *5-endo-trig* циклизация и анхимерното съдействие като вътрешен нуклеофил само на съседната алкоксикарбонилна група с получаване на 5-(бензенсулфинил)-2-фуранони. Изучено е взаимодействието на 4-сулфонил аленкарбоксилати с електрофилни реагенти [2], като е установено, че реакциите протичат с образуването на (3*E*)-4-(метансулфонил)-3-алкеноати или смес от (3*E*)-4-(метансулфонил)-3-алкеноати и (3*E*)-2-метилен-4-(метансулфонил)-3-алкеноати.

Благодарности

Настоящата работа е част от научно-изследователски проекти № РД-08-243/2013 год. и № РД-08-208/2014 год., които се финансират от фонд „Научни изследвания“ на ШУ „Еп. Константин Преславски“, както и на Проект BG051PO001-3.3.06-0003 „Изграждане и устойчиво развитие на докторанти, постдокторанти и млади учени в областта на природните, техническите и математическите науки“.

[1] Ivanov, I. K.; Parushev, I. D.; Christov, V. Ch. Bifunctionalized Allenes. IX. An Efficient Method for Regioselective Synthesis of 4-Heteroatom-functionalized Allenecarboxylates, *Heteroatom Chem.* **2013**, *24*, 322 – 331.

[2] Ivanov, I. K.; Parushev, I. D.; Christov, V. Ch. Bifunctionalized allenenes. Part XII. Electrophilic Cyclization and Addition Reactions of 4-Sulfinylated and 4-Sulfonylated Allenecarboxylates, *Phosphorus, Sulfur, Silicon* **2014**, *189*, 1 – 11.

СИНТЕЗ И РЕАКЦИИ НА ЦИКЛОИЗОМЕРИЗАЦИЯ НА ФОСФОРИЛИРАНИ АЛФА-ХИДРОКСИАЛЕНИ

И. Исмаилов, И. Иванов, В. Христов

Шуменски университет „Епископ К. Преславски“

*Факултет по природни науки, Катедра по органична химия и технология
9700 Шумен, ул. Университетска 115, E-mail: ismail78@abv.bg*

В настоящият доклад се дискутират резултатите от изследваните реакции на циклоизомеризация на 1-хидроксиалкил- заместени аленфосфонати и аленил фосфин оксиди с т.нар. йони на монетни метали като Ag^+ , Au^+ , Pd^{2+} , Cu^+ и др.

Създаден е удобен и региоселективен метод за синтез на фосфорилирани α -хидроксиалени, чрез [2,3]-сигматропна прегрупировка на междинно образувашите се фосфити и фосфинити, получени при взаимодействието на (тетрахидро-2H-пиран-2-илокси) алкиноли с диметилхлорофосфит или дифенилхлорофосфин. Реакцията за сваляне на защитата на хидроксилната група се осъществява в етанол в присъствие на каталитични количества на PPTS с получаване на очакваните α -хидрокси-аленфосфонати и аленил фосфин оксиди.

Изследвани са реакциите на циклоизомеризация на получените α -хидроксиаленфосфонати и аленил фосфин оксиди при оптимизиране на реакционните условия, като влияние на разтворителя, реакционната температура и молно съотношение на катализатора спрямо реагента. Установено, е че реакциите на циклоизомеризация на 1-хидроксиалкил-заместени аленфосфонати и аленил фосфин оксиди протичат с участието на хидроксилната група в циклизация с получаването на 3-фосфорил-2,5-дихидрофурани.

Благодарности

Настоящата работа е част от научно-изследователски проекти № РД-08-243/2013 год. и № РД-08-208/2014 год., които се финансират от фонд „Научни изследвания“ на ШУ „Еп. Константин Преславски“, както и на Проект BG051P0001-3.3.06-0003 „Изграждане и устойчиво развитие на докторанти, постдокторанти и млади учени в областта на природните, техническите и математическите науки“.

НАСОЧЕН СИНТЕЗ И РЕГИОСЕЛЕКТИВНИ ЦИКЛИЗАЦИИ НА 4-ХИДРОКСИ-1,3,4-ТРИФЕНИЛАЛЕНИЛ ФОСФОНАТ И ФОСФИН ОКСИД

Х. Хасанов, И. Иванов, В. Христов

*Шуменски университет „Епископ К. Преславски“,
Факултет по природни науки, Катедра по органична химия и технология,
9700 Шумен, ул. Университетска 115, E-mail: hasi_@abv.bg*

В продължение на нашите изследвания върху реакциите на циклизация на функционализирани алени, в настоящия доклад се дискутират резултатите от изследваните електрофилни циклизации и реакции на циклоизомеризация на 4-хидрокси аленфосфонат и аленил фосфин оксид със защитена и незащитена НО група. Създадени са методи за тяхното получаване чрез [2,3]-сигматропна прегрупировка на съответните фосфит и фосфинит, получени при взаимодействието на (тетрахидро-2Н-пиран-2-илокси) 3-бутин-2-ол с диметилхлорофосфит или дифенилхлорофосфин.

Изследвани са реакциите на получените 4-хидрокси аленфосфонати и аленил фосфин оксиди със защитена и незащитена НО група с електрофилни реагенти, като е установено, че протичат с получаване на разнообразни хетероциклени и ненаситени съединения. Показано е, че електрофилните реакции на аленфосфонатите протичат *regio*селективно с *5-endo-trig* циклизация и анхимерното съдействие като вътрешен нуклеофил само на фосфонатната група с получаване 2,5-дихидро-1,2-оксафосфол-2-они. Установено е, че взаимодействието на аленил фосфин оксидите с електрофи протича с атака на електрофилния реагент по 2,3-двойнта връзка на аленовата система и следваща нуклеофилна атака с получаване на ациклените – (1E)-1-алкенил фосфин оксиди. Реакциите на 4-хидрокси-заместените аленфосфонати и аленил фосфин оксиди с йони на т. нар. монетни метали, се извършват с петчленна циклоизомеризация с участието на хидроксилната група и получаване на 2-фосфорил-2,5-дихидро-фураните.

Благодарности

Настоящата работа е част от научно-изследователските проекти № РД-08-243/ 2013 год. и № РД-08-208/ 2014 год., които се финансират от фонд „Научни изследвания“ на ШУ „Епископ Константин Преславски“.

ИЗСЛЕДВАНЕ НА РАДИКАЛ-УЛАВЯЩА АКТИВНОСТ НА РАСТИТЕЛНИ ЕКСТРАКТИ С ПРИЛОЖЕНИЕ В МЕДИЦИНСКАТА ПРАКТИКА

Е. Петрова, М. Дочева, Ст. Статкова-Абегхе

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

Растенията се използват в лечебната практика от древността и до днес. От средата на 90-те години на миналия век досега, интензивно се изследват флавоноид-съдържащи растителни екстракти с антиоксидантни свойства. Една от най-съществените причини за това е натрупването на доказателства за причинна взаимовръзка между оксидативен стрес и канцерогенеза.

Едно от научните направления в катедрата по Органична химия на ПУ „Паисий Хилендарски“ е приложение на хроматографските методи във фитохимични изследвания в областта на полифенолните растителни комплекси. В началото на годината бяха публикувани резултатите от изследване на флавоноидния състав и радикал-улавящата активност на екстракти от култивирани сортове тютюни. Представлява интерес съпоставяне на антиоксидантните свойства на получените тютюневи екстракти, богати на флавоноиди, с широко навлезли в медицинската практика растителни екстракти и препарати с антиоксидантно действие.

Целта на изследването е да се определи радикал-улавящата активност на богатите на флавоноиди екстракти от: *Ginkgo Biloba* (на фирма Pure Bukl, Roseburg USA, от 2013 г.); *Silybum marianum* (Silymarin, търговски продукт на фирма Wuxi Gorunjie Technology Co. Ltd, Jiangsu, China, със съдържание на флавоноиди – 80%) и *Folia Betulae* (Неоренал (NEORENAL) на фирма Neopharm, съдържащ 390 mg стандартизиран сух екстракт от брезови листа с 330 mg активни вещества, от които флавоноиди – 80 mg) с приложение в медицинската практика и резултатите да се съпоставят с данни от изследвания, проведени върху екстракти от ориенталски тютюн сорт Джебел басма 1, предоставен от Институт по тютюна и тютюневите изделия.

При проведеното изследване на радикал-улавящата активност, чрез DPPH-метод, са установени стойностите на IC_{50} за изследваните екстракти. За всеки от изследваните обекти са проведени три различни опита с използване на различни разреждания. Получените експериментални данни са представени графично и е определен интервала на линейна зависимост.

Таблица 1. Радикал-улавяща активност (IC_{50} $\mu\text{g/ml}$) на екстракти

Изследван екстракт	IC_{50} $\mu\text{g/ml}$
Ginkgo Biloba	8.6
Neorenal	31.4
Silymarin	36.1
Тютюн Джебел басма 1	43.9

По-високата средна стойност на IC_{50} $\mu\text{g/ml}$ за Silymarin – 36.1 в сравнение със стойностите за екстракт от Ginkgo Biloba (8.6), вероятно се дължи на структурни различия във флавоноидния комплекс на двете растения. Получената стойност за радикал-улавящата активност на обогатен на флавоноиди екстракт от тютюн Джебел басма 1 $IC_{50} = 43.95 \mu\text{g/ml}$, е в същия порядък, както за Silymarin и Neorenal.

Врезултат на проведените изследвания са определени стойностите на IC_{50} за всеки от изследваните екстракти чрез използване на DPPH-метод и при едни и същи условия: разтворител метанол; концентрация на реагента 0,12mM; време за реакцията 30мин; измерване при 517nm.

Най-висока радикал-улавяща активност притежава екстрактът от Ginkgo biloba със стойности на IC_{50} **8.6 $\mu\text{g/ml}$** , което корелира със структурата на съдържащите се флавоноиди в екстракта.

Neorenal (IC_{50} **31.4 $\mu\text{g/ml}$**) и екстрактът от Бял трън Silybum marianum – Silymarin (IC_{50} **36.1 $\mu\text{g/ml}$**), се доближават по радикал-улавяща активност до екстракт от тютюн Джебел басма 1 със стойности на IC_{50} **43.9 $\mu\text{g/ml}$** , изпитвани при едни и същи условия.

Изследванията са проведени с финансовата подкрепа на поделение „Научна и приложна дейност“ при ПУ „П. Хилендарски“, договор № СП13 ХФ002/20.06.2013.

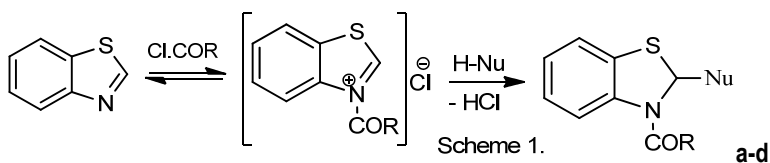
СИНТЕЗ НА НОВИ БЕНЗОТИАЗОЛОВИ ПРОИЗВОДНИ

Ст. Статкова-Абегхе, Й. Стремски, С. Гандова

ПУ „П. Хилендарски“, Химически Факултет, Катедра Органична химия,
Пловдив 4000, ул. „Цар Асен“ 24, e-mail: stab@uni-plovdiv.bg

Бензотиазола и неговите производни, са фармакологично важни структури с разнообразна биологична активност. През последните две десетилетия бензотиазолови производни са широко изследвани за противораково действие.

В отговор на патогенна атака, растенията индуцират биосинтеза на нискомолекулни антимикубни съединения. Тези така наречени фитоалексини показват голямо структурно разнообразие и често са ограничени до малък брой растителни видове. Samalexin (2-(1H-индол-3-ил) тиазол) е естествен индолов фитоалексин, намерен в листата на *Camelina Sativa*. В допълнение към своето противогъбично действие, Samalexin също проявява антипролиферативен ефект при ракови клетъчни линии. Benzosamalexin е синтетичен аналог на Samalexin, активен срещу ракови клетъчни линии. В сравнение с Samalexin проявява минимална токсичност към нормалните клетки.



- (a) R=OMe, Nu= Indole, (b)R=OEt, Nu= Indole,
(c) R= Ph, Nu= Indole (d)R=OEt, Nu= Pyrrole

В нашите изследвания, предлагаме метод за синтез на нови производни на Benzosamalexin, чрез реакция на алфа-амидоалкилиране на хетероароматни съединения с N-ацилиминиеви реагенти получени от бензотиазол и различни ацилхлориди. Реакцията протича региоселективно с получаване на 3-заместени индолови производни и 2-заместени пиролови производни. Получените съединения са изолирани и пречистени чрез препаративна колонна хроматография и характеризирани чрез MS, ¹H-NMR, ¹³C-NMR и IR спектри.

Изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на поделение „Научна и приложна дейност“ при ПУ „П. Хилендарски“, договор № НИ 13 ХФ 006.

ПРОТЕАЗНА МОДИФИКАЦИЯ НА СЛЪНЧОГЛЕДОВИ БЕЛТЪЦИ

П. Иванова, Я. Вълев, Л. Колева

*Университет по хранителни технологии – Пловдив,
Катедра „Биохимия и молекулярна биология“,
бул. „Марица“ №26, Пловдив 4002, petia_ivanova_georgieva@abv.bg*

Протеазната модификация на хранителни белтъци е един от методите за подобряване на техните качества. Дълбоката хидролиза увеличава значително разтворимостта, термостабилността и усвоимостта им, а при ниска степен на хидролиза е възможно подобряване на пенообразуващите и емулгиращи свойства.

В настоящото изследване е проучена възможността за ограничена протеолиза на слънчогледови белтъци под действие на трипсин, пепсин и микробна алкална протеаза. Установено е, че изследваният слънчогледов белтъчен изолат не е подходящ субстрат за действие на трипсина. Пепсинът и алкалната протеаза хидролизират слънчогледовите белтъци в различна степен, в зависимост от количеството на ензимния препарат и продължителността на реакцията. Под действие на 2 mg пепсин / g белтък, за 15 min, при 40°C се наблюдава съществена промяна в молекулномасовото разпределение при SDS-PAGE, която се изразява в изчезване на фракциите с Mm от 69 до 142 kDa и появата на нови, нискомолекулни – от 10 до 24 kDa. Изследвани са функционалните свойства на белтъците, хидролизирани при тези условия. Установено е, че термостабилността силно се намалява, а разтворимостта се увеличава само в слабокиселата област – при pH 4 – 6. Пенообразуващата способност се подобрява в целия изследван интервал (pH 2 – 10), като най-съществено (повече от 2 пъти) е при pH 4 и pH 6.

ЛОГИКАТА НА ХИМИЧНИЯ СИНТЕЗ

Д. Христов, С. Николова

*Медицинска химия – втори курс,
Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет,
ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000; danail.g.hristov@gmail.com*

Химичният синтез на въглерод-съдържащите молекули е главен обект на изследване в органичната химия в продължение на повече от век. Въпреки това продължават да се изследват и откриват много нови съединения. Последното десетилетие, например, е причислено към „златните години“ в тоталния синтез на природни съединения. Природните съединения представляват най-сложната форма на материята, позната във Вселената. В последните години се наблюдава огромен интерес към синтеза и конструирането на сложни органични молекули, аналози на природните съединения. Както казва Elias James Corey в лекцията си при получаване на Нобелова награда за химия през 1990 г.: „Chemical synthesis is uniquely positioned at the heart of chemistry, the central science, and its impact on our lives and society is all pervasive“. Синтезът на тези природни аналози, както и на милиони неприродни съединения, е едно от най-големите предизвикателства за химията в наши дни. Това потвърждава и един от последователите на Corey – Nicolaou, който от своя страна създава група за синтез на аналози на антибиотика Calicheamicin. Както споделя ученият: „At first, I was completely speechless. This cannot be right, I thought; it does not look stable.“ Nicolaou се води от идеята да създаде елегантна и ефективна синтетична стратегия, която да „улови“ най-сложната и разнообразна страна на природното съединение, което дотогава се е считало за невъзможно да се синтезира.

Основната логика на органичния синтез е да „сглоби“ дадено органично съединение (целева молекула) от налични изходни вещества и реагенти по най-добрия начин. Този процес обикновено започва с разработване на синтетичен план или стратегия, която включва разнообразни синтетични реакции в определен ред. Ако планът се нуждае от трансформация, тя трябва предварително да бъде доказана. По този начин, органичния синтез непрекъснато се обогатява с нови открития, които сами по себе си са своеобразни подцели в рамките на една програма, насочена към синтеза на целева молекула.

Или както R. B. Woodward казва: „There is excitement, adventure, and challenge, and there can be great art, in organic synthesis“.

**СЕКЦИЯ „АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ“
И
„НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ“**

Председател: доц. д-р Кирил Гавазов

ИЗСЛЕДВАНЕ ОЦВЕТЯВАНЕТО НА АРХЕОЛОГИЧНИ СЪТЪКЛА (ВНОС И МЕСТНО ПРОИЗВОДСТВО ОТ XI – XIII В.), ОТКРИТИ В СРЕДНОВЕКОВНИЯ НЕКРОПОЛ В ШИПОТСКО (БАНСКО)

А. К. Тенева и А. К. Дечева

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

Фрагменти от оцветени стъклени гривни и от синьо венецианско стъкло са открити на територията на средновековния некропол в местността Шипотско, югозападно от Банско. Тяхното оцветяване е изследвано с метода рентгено-флуоресцентен анализа с пълно вътрешно отражение (TXRF). Определено е съдържанието на 3d-преходните метали (Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu и Zn), като за валидиране на метода са използвани сертифицирани сравнителни материали Soda-Lime-Glass BAM-S005 (A и B) и Ga като вътрешен стандарт. Пробите са анализирани във вид на суспензии, като се прибавя Triton X 114 за тяхното стабилизиране. Оптимизирани са експерименталните условия – времето за смилане на пробите, количеството проба в суспензията, концентрацията на вътрешния стандарт и времето на измерване. Получените резултати показват, че оцветяването в изследваните стъкла се дължи на елементите Co, Fe и Mn, както и на атмосферата в пещта. Относителното стандартно отклонение за всички елементи е под 10% RSD. Резултатите потвърждават приложимостта на TXRF като техника за изследване на оцветяването в археологични стъкла.

Фрагментите от стъклени гривни са гробни дарове от XI – XIII век. Те са най-вероятно местно масово производство в стъklarска работилница, разположена в границите на Средновековна България и работила за търговия. От друга страна, фрагментите от венецианско стъкло не са гробни дарове. Открити са в средновековния пласт и са произведени и внесени от Западна Европа. Това доказва, че наред с местното стъклопроизводство на територията на България през Средновековието е осъществяван и интензивен търговски обмен с Египет, Византия, Близкия изток и Западна Европа.

Ключови думи: *Средновековни стъклени фрагменти, оцветяващи елементи, TXRF*

Благодарности на ОП РЧР, съфинансирана от ЕСФ по проект BG051PO001-3.3.06-0050

НОВИ МЕТОДИ ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА НАНОРАЗМЕРНИ МАТЕРИАЛИ

Ц. Лазарова, Д. Ковачева

*„Институт по обща и неорганична химия“, БАН,
ул. „Акад. Георги Бончев“ 11, София 1113, cveti_ura@abv.bg*

В настоящия доклад са разгледани предимствата на два от най-модерните методи за синтез на наноматериали – синтез чрез изгаряне от разтвор и сонохимичен синтез. Синтезът чрез изгаряне от разтвор е може би най-популярният подход за приготвянето на наноматериали и се практикува в 65 страни. Този синтез се характеризира с протичане на силно екзотермична реакция между два изходни компонента (гориво и окислител). Локалните температури при тази реакция варират от 500 до 3000°C. Специфичните характеристики на този синтез допринасят за уникалните свойства на синтезираните продукти. Първо, реакционната среда първоначално е в течно състояние (пр. воден разтвор) което позволява смесване на реагентите на молекулярно ниво, като по този начин се позволява формирането на хомогенни продукти. Второ, високата температура на реакцията осигурява получаване на кристални наноразмерни продукти за много кратко време.

Сонохимията е изследователска област при която молекулите на реагентите участват в химични реакции и превръщания, дължащи се на прилагането на мощна ултразвукова радиация (20 kHz – 10 MHz). Физичната основа за прилагането на метода е акустичната кавитация. Сонохимичното получаване на наноматериали започва в последното десетилетие на XX век, но в последно време броят на публикациите по темата нараства експоненциално.

Химическите приложения, които ни предоставя ултразвука, го превръщат в едно интересно поле за изследвания.

В доклада са представени и сравнени физикохимичните характеристики на кобалтов ферит с шпинелен тип структура, синтезиран по двата гореописани метода.

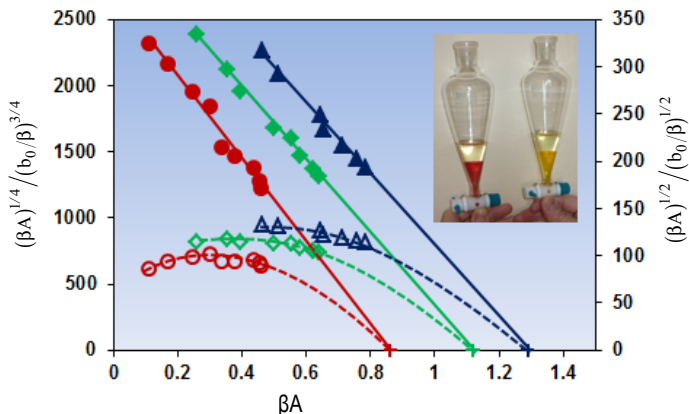
Докладът е финансиран с помощта на проект BG051PO001-3.3.06-0050. Програма: „Създаване на висококвалифицирани специалисти по съвременни материали за опазване на околната среда: от дизайн до иновации“

ЕКСТРАКЦИОННО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ НА ТРОЙНИ КОМПЛЕКСИ НА ВАНАДИЙ (V) С 4-(2-ТИАЗОЛИЛАЗО) ОРЦИНОЛ И ТЕТРАЗОЛИЕВИ СОЛИ

Т. Стефанова, К. Томова, К. Гавазов

Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет,
Катедра ОНХМОХ, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, stefanova.teodora@abv.bg

Изучени са комплексобразуването и течно-течната екстракция в системи съдържащи ванадий(V), 4-(2-тиазолилазо)орцинол (ТАО), тетразолиева сол (TZS), вода и хлороформ. Използвани са следните TZS: 3-(4,5-диметил-2-тиазол)-2,5-дифенил-2*H*-тетразолиев бромид (МТТ), 3-(2-нафтил)-2,5-дифенил-2*H*-тетразолиев хлорид (Тетразол виолет, TV) и 2-(4-йодофенил)-3-(4-нитрофенил)-5-фенил-2*H*-тетразолиев хлорид (INT). Намерени са оптималните екстракционни-спектрофотометрични условия за всяка от системите (рН на водната фаза, концентрация на реактивите, време за екстракция, абсорбционен максимум). С помощта на различни методи са изчислени константите на екстракция и е определен съставът на комплексите (2:2:2).



Благодарности

Авторите изказват благодарност на ФНИ при ПУ „Паисий Хилендарски“ за финансовата подкрепа (договори НИ13-ХФ-006 и НИС-14-ХФ003).

**БЪРЗ И НАДЕЖДЕН МЕТОД ЗА ОПРЕДЕЛЯНЕ
НА АПО-ФИТОХЕЛАТИНИ (GSH, PC2-PC5) В РАСТЕНИЯ
ПОСРЕДСТВОМ CORE-SHELL HPLC-MS**

К. Бърдаров*, М. Найденов, К. Амирова**, Р. Джингова***

**Софийски университет „Св. Климент Охридски“,
Факултет по химия и фармация, ул. „Джеймс Баучер“ 1, София 4000,
krum.bardarov@chem.uni-sofia.bg*

***Пловдивски университет „Паисий Хилендарски,
Биологически факултет, ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000*

Растенията са развили обширен пакет от адаптивни отговори срещу биологичното действие на тежките (и изобщо токсични) метали (Cd, Pb, Cu, Zn, Hg). Това включва имобилизиране, изключване, хелатиране и отделяне на металните йони в специализирани компартменти (органели). Често в тези процеси участват метал-свързващи лиганди. Някои от тези лиганди са идентифицирани в растенията и включват органични киселини, аминокиселини, пептиди и полипептиди.

Полипептидите включват металотионини (MTs), малки генетично кодирани, богати на цистеин полипептиди и фитохелатини (PCs), които обратно, са ензимно-синтезирани богати на цистеин пептидни продукти на ензима фитохелатин синтетаза. Подробна информация за функцията и експресията на MTs в растенията може да се намери в работата на Fordham-Skelton [1], а за фитохелатините в [2].

Количественото определяне на фитохелатините е от особен интерес за медицината, биологията и науките за околната среда, тъй като позволява развитието на биохимичните модели на хомеостазата в организма. Поради тази причина и интересът към бързи, надеждни и лесни за рутинно изпълнение методи за анализ е голям.

С настоящата работа се представя течнoхроматографски метод с маспектрална детекция и подходяща пробоподготовка за количествено определяне на най-разпространените фитохелатини (глутатион, фитохелатин 2, фитохелатин 3, фитохелатин4, фитохелатин5) в растителни проби (корени, събла и лис-

та). В рамките на пробоподготовката фитохелатините се освобождават от техните метал-свързани комплекси и се определят за 3 мин. с граници на определяне от 25 ppt (GSH) до 25 ppb (PC5).

- [1] Fordham-Skelton A. P., Robinson N. J., Goldsbrough P. B. (1998) Metallothionein-like genes and phytochelatins in higher plants. In S Silver, W Walden, eds, Metal Ions in Gene Regulation. Chapman & Hall, London, pp. 398 – 431
- [2] Christopher S. Cobbett, Phytochelatins and Their Roles in Heavy Metal Detoxification, Plant Physiology, July 2000, Vol. 123, pp. 825 – 832

**НОВИ ПЛАТИНОВИ КОМПЛЕКСИ
НА 2-АМИНОПИРИДИН И 4-АМИНОПИРИДИН –
ПОЛУЧАВАНЕ И СПЕКТРАЛНО ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ**

С. Чакърова, Г. Генчева

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

В областта на насочен синтез на противотуморни препарати, платиновите комплекси, с „некласическа“ за цитотоксична структура, представляват особен интерес. Една от стратегиите при програмиране на новите структури е получаване на комплекси на платината във високи и междинни степени на окисление. Счита се, че това е подход за модулиране на противотуморните свойства чрез контрол на кинетичните отнасяния и термодинамичната стабилност на химичните видове в биологична среда. Изследването е насочено към получаването на нови смесено-валентни платиновы (Pt^{2+} , Pt^{3+}) полиядрени комплекси, в които формално платината е в междинна степен на окисление, и изучаване на потенциала на съединенията от този клас като противотуморни агенти. За лиганди, стабилизиращи полиядрената структура, са изучавани серия от аминопиридини. В доклада ще бъдат представени резултатите върху процесите на комплексообразуване на $PtCl_4^{2-}$ с 2-аминопиридин и 4-аминопиридин, както и влиянието на лигандната структура и реакционните условия върху получаването на смесено-валентни, интензивно оцветени платиновы комплекси. Взаимодействията между изходното платиново съединение и лигандите са следени потенциометрично в рамките на 24 часа. Комплексообразуването е доказано с помощта на електронно-абсорбционни спектри чрез отместване на ивиците, характерни за свободните лиганди от УВ-областта, и поява на нови ивици във видимата област. Изучени са условията за възпроизводимо получаване на комплексите в твърда фаза. Начинът на координиране на лигандите в комплексите е доказан с помощта на ИЧ-спектроскопия.

СМЕСЕНОЛИГАНДНИ КОМПЛЕКСИ НА РУТЕНИЙ С ТЕРПИРИДИН И 2,4-ДИТИОХИДАНТОИНИ

С. Асанова*, А. Ахмедова*, П. Маринова**

*Софийски университет, Факултет по химия и фармация,
бул. „Джеймс Баучър“ 1, София 1164, България

**Пловдивски университет, Химически факултет,
ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, България, e-mail: saasanova@gmail.com;

Комплексообразователната способност на серия от циклоалкани 5-спиро-2,4-дитио-хидантоини с метални йони от първи преходен ред беше детайлно изследвана, използвайки интегриран подход от квантово-химични и спектроскопски методи [1, 2]. Скорошни изследвания върху противотуморната активност на новосинтезирани Pt(II) и Ru(III) комплекси на 2,4-дитио-хидантоини с *обемисти ароматни заместители* на 5-то място в хидантоиновия пръстен показваха концентрационно зависима активност срещу три вида ракови клетъчни линии. Описанието на структурата на комплексите, обаче, остава недоизяснено поради очакваното образуване на полимерни комплекси чрез едновременното координиране и на двете тионни групи на лигандите. Поради това, са проведени нови синтези на смесено-лигандни комплекси на Ru(III) с някои 2,4-дитио-хидантоини и тридентатния лиганд терпиридин (terpy), за които се очаква добре дефинирана структура и състав без образуването на полиядрени комплекси. Комплексите с циклохексан-5-спиро-2,4-дитио-хидантоин и 9'-флуорен-5-спиро-2,4-дитио-хидантоин бяха синтезирани в алкохолна среда, използвайки Ru(terpy)Cl₃ като прекурсор, получен непосредствено преди употреба. Получените комплекси са разтворими и бяха изолирани след утаяване с неполярен разтворител (етер) или чрез добавяне на подходящ противйон. Комплексите са охарактеризирани чрез вибрационна (ИЧ) и електронна (УВ-Вид) спектроскопия, както и ядрено-магнитен резонанс (NMR). В настоящия доклад ще бъде дискутирана структурата на комплексите на базата на наличните експериментални и квантово-химични резултати.

Благодарности

Авторите изказват благодарност на Националния Фонд „НИ“ (договор ДФНИ-Б01/0014 – 2012) и Фонд „НИ“ към Софийски Университет (договор 074/2014) за финансовата подкрепа.

1. Ahmedova A., Marinova P., Paradowska K., Stoyanov N., Wawer I., Mitewa M., *Inorg. Chim. Acta*, 2010, 363 3919 – 3925.
2. Ahmedova A., Marinova P., Paradowska K., Marinov M., Wawer I., Mitewa M., *Polyhedron*, 2010, 29 1639 – 1645.

**НОВ МЕТОД ЗА ИНДИРЕКТНО ОПРЕДЕЛЯНЕ
НА АКТИВНО ВЕЩЕСТВО ВЪВ ФУНГИЦИДА ЦИНЕБ
ЧРЕЗ ICP-OES ИЗМЕРВАНЕ НА СЯРА**

Д. Чакърова-Димитрова, В. Кметов

**ПУ „Паисий Хилендарски“,*

Катедра Аналитична химия и Компютърна химия, dilldimitrova@yahoo.com

Дитиокарбаматните фунгициди са един от най-често срещаните класове пестициди, използвани в селското стопанство. В Агрис АД на база етилен бис (дитиокарбамати) EBDS се произвеждат фунгициди от така наречена „група на манеба“ – цинеб, манеб и манкозеп, за чиято пазарна реализация се изисква охарактеризиране на активната субстанция с висока точност и прецизност. Класическият (CIPAC) метод за определяне на активното вещество EBDS се основава на титриметрично определяне на серовъглерода, получен след термичното разлагане на етилен бис (дитиокарбаматите).

В настоящата работа се разглежда нов инструментален метод за индиректно определяне активното вещество в цинеб, чрез ICP-OES определяне на количеството на свързаната в EBDS сяра. Изпитани са две процедури на разваряване на пробите в алкални среди: I) с NaOH и II) с амоняк. Вторият начин е по-подходящ за последващия ICP-OES инструментален анализ.

Оценени са аналитичните добиви и прецизността на анализа при наблюдение на три атомно емисионни линии на сяра – 180.731 nm; 182.034 nm; 182.624 nm. Аналитичните параметри са оптимизирани за постигане на адекватна калибровка, стабилност и повтаряемост на сигналите, висок и устойчив аналитичен добив.

При режим на въвеждане – свободна аспирация на амонячни разтвори на цинеб, радиално наблюдение за линия 182.624 nm и калибровка по метода на ограничаващите стандарти с матрични калибранти, са постигнати: оценки за активно вещество в интервала 98 – 102 % спрямо референтни стойности (от CIPAC метод и от сертифицирани материали); възпроизводимост с RSD < 1 % за търговски продукти от цинеб съдържащи активно вещество от 80 до 99 %.

**СЕКЦИЯ „ФИЗИКОХИМИЯ“
И
„ИЗЧИСЛИТЕЛНА ХИМИЯ“**

Председател: доц. д-р Нина Димчева

НАНОКОМПОЗИТНИ SiO_2/C МАТЕРИАЛИ – ПОЛУЧАВАНЕ И ПРИЛОЖЕНИЕ

Н. Стоева*, И. Спасова*, Р. Николов, М. Христова***

**Институт по обща и неорганична химия, БАН,
ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 11, 1113 София, n.stoeva@svr.igic.bas.bg
**Химикотехнологичен и металургичен университет, 1756 София*

Нанокompозитите предизвикват все по-голямо внимание поради генерирането на забележителни допълващи се свойства, които не могат да бъдат получени от отделните компоненти и поради възможност за контролирано получаване. Силициевият диоксид и активният въглен играят важна роля в материалознанието предвид практическото им приложение. Органично-неорганичните нанокompозити са хомогенни и носят предимствата едновременно на органичните полимери (гъвкавост, издръжливост, хидрофобност, възможност за последващо функционализиране) и на неорганичните компоненти (механична и термична стабилност). Нанокompозитите от SiO_2 -въглен предизвикват нарастващ интерес поради синергично развитие на термичните, химичните, механичните и др. свойства, в сравнение с тези на отделните компоненти.

Различни подходи са използвани във времето за получаването им, като двата основни са посредством внасяне на въглерод в колоиди на силициев диоксид и чрез вкарване на въглерод в мезопорест силициев диоксид. Разгледани са стратегиите за получаване на нанокompозити от SiO_2 -C. Обърнато е внимание на получаването на неподредени (неструктурирани) композити посредством зол-гел метод и мезоструктурирани композити (посредством функционализиране, нанокастинг и директен синтез).

Приложени са примери за получаване и приложение на нанокompозити от SiO_2 -C чрез използване на въглеродни материали с различни адсорбционнотекстурни характеристики като носители на катализатори за редукция на азотни оксиди. Намерено е, че порьозната текстура на композитите се доминира от използвания въглерод, а тя от своя страна е определяща за взаимодействието активна фаза-носител и оттам за каталитичната активност.

Финансовата подкрепа е по проект BG051PO001-3.3.06-0050.

ХЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧНО ОКИСЛЕНИЕ НА КИСЕЛО ОРАНЖЕВО 7 БАГРИЛО С УЧАСТИЕ НА $\text{Co}_3\text{O}_4\text{-Bi}_2\text{O}_3$ КОМПОЗИТНИ МАТЕРИАЛИ

В. Иванова, С. Трънкова, Ст. Христоскова, М. Стоянова

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

Синтезирани са наноразмерни $\text{Co}_3\text{O}_4\text{-Bi}_2\text{O}_3$ композитни оксиди като ефективни катализатори за хетерогенно активиране на пероксимоносулфат (PMS) и последващо окислително разграждане на моделното багрило кисело оранжево 7 (AO7) във водна среда. Съдържанието на Co и Bi в синтезираните катализатори беше определено с помощта на оптична емисия с индуктивно свързана плазма. Синтезираните оксидни композитни образци демонстрират много висока каталитична активност по отношение активирането на PMS с генериране на сулфатни радикали, които ефективно деструктират моделния органичен замърсител с висока скорост. Най-добри каталитични свойства проявява $40 \text{ wt. } \text{Co}_3\text{O}_4\text{-Bi}_2\text{O}_3$, с участието на който за 12 минути се постига пълно разрушаване на хромофорната структура на багрилото при условията на експеримента ($C_{\text{catalyst}}=0.10 \text{ g/l}$, $\text{AO7:PMS}=1:6$, $C_{\text{AO7}}=50 \text{ mg/l}$). Значително по-ниска е каталитичната активност на непромотираната активна фаза Co_3O_4 – за същия реакционен период се постига само 38% степен на обезцветяване на разтвора, докато Bi_2O_3 не е способен да промотира разлагането на окислителя с генериране на радикалови частици. Съществено подобряване на каталитичните свойства на Co_3O_4 вследствие модифицирането му с бисмут може да се отдаде на базичния характер на Bi_2O_3 , облекчаващ формирането на повърхностни Co(II)-OH комплекси, играещи основна роля при хетерогенното активиране на PMS. Генерирането на радикалови частици, предизвикващи трансформация на молекулата на багрилото, е потвърдено чрез резултатите от експериментите, проведени с добавяне на $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ и третичен $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$, действащи като „трапери“ на образуваните радикали. Кинетичните данни показват, че окислителната деградация на багрилото се подчинява на кинетичните закономерности на реакции от първи порядък по отношение на AO7. Изследвана е и стабилността на синтезираните катализатори и влиянието на различни операционни параметри (pH, концентрация на PMS, количество на катализатора, йонната сила на разтвора) върху ефективността и селективността на окислителния процес.

Авторите изказват благодарност на НФНИ (Проект ДФНИ-Е01/7) и на Фонд НИ при ПУ за оказаната финансова подкрепа (Проект НИ 13 ХФ 006).

**ТЕОРЕТИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА МЕХАНИЗМИТЕ
НА ФОТОИНДУЦИРАНА ЦИКЛОДИМЕРИЗАЦИЯ НА ЦИТОЗИНА
И 2,4-ДИАМИНОПИРИМИДИНА ПРЕЗ КОНИЧНИ СЕЧЕНИЯ S_1/S_0**

П. Кънчева, В. Делчев

*ПУ „Паисий Хилендарски“, Катедра Физикохимия,
ул. Цар Асен 24, Пловдив 4000, pkancheva@uni-plovdiv.net*

Механизмите на фотоиндуцирана циклодимеризация на цитозина и 2,4-диаминопиримидина са изследвани с неемпиричния метод CC2. Структурите на димерите и циклодимерите, както и на коничните сечения S_1/S_0 са оптимизирани на CASSCF(2,2)/6-31G* ниво. Реакционните пътища на възбудените състояния са изучени чрез линейна интерполация във вътрешни координати (ЛИВК). Тя предполага линеен преход по ППЕ, свързващ минимумите на продуктите и изходните вещества със съответните конични сечения S_1/S_0 .

Резултатите показват, че фотореакциите протичат през $1\pi\pi^*$ възбудените състояния, чиито реакционни пътища от минимумите на циклодимерите към коничните сечение S_1/S_0 не показват наличието на енергетични бариери. Обратно, енергетични бариери са намерени за реакционните пътища на $1\pi\pi^*$ възбудените състояния свързващи стикованите димери и коничните сечения S_1/S_0 . Изключение прави *транс-син* циклодимеризацията на 2,4-диаминопиримидина. Енергетичните бариери при цитозина са по-високи от тези при 2,4-диаминопиримидина. Следователно, той би реагирал фотохимично по-трудно до циклодимер, отколкото 2,4-диаминопиримидина.

Изследванията продължават в посока изчисление построяване на повърхнините на потенциална енергия на реакциите в област, близка до коничните сечения. Те дават информация за най-вероятните фотопродукти след вътрешната конверсия през коничните сечения S_1/S_0 .

СЕКЦИЯ „ХИМИЧНИ ТЕХНОЛОГИИ“

Председатели:

доц. д-р Гинка Антова и доц. д-р Боян Боянов

СИНТЕЗ И ИЗСЛЕДВАНЕ НА ОПТИЧНОАКТИВНИ СТЪКЛОКЕРАМИЧНИ МАТЕРИАЛИ

И. Костова*, Т. Пашова**

*ПУ „Паисий Хилендарски“, Химически факултет,
ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, България, irena_k87@abv.bg

**Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски“,
Физически факултет, Пловдив, България

Материалите дотирани с редкоземни елементи притежават редица важни оптични свойства, което позволява прилагането им като сензори, оптични и рентгенови детектори, лазери и др. [1]. Посредством високотемпературен синтез са получени стъклокерамични и поликристални материали дотирани със самарий. Получените образци са подложени на термично третиране с цел получаване на нанокристали в структурата на материала. Измерена е тяхната плътност и на тази база е изчислен моларният им обем.

Синтезираните материали са изследвани чрез Диференциална сканираща калориметрия (ДСК) и температурно модулирана диференциална сканираща калориметрия (ТМДСК) с цел определяне температура на встъкляване (T_g) и кристализация (T_c) преди и след процеса на топлинна обработка. Извършен е рентгенодифракционен анализ за охарактеризиране на структурата. Установено е, че при определени условия в структурата на някои от термично третирани материали са формирани нанокристали.

Композициите дотирани със самарий са облъчени с различни диоди и лазери с дължина на вълната в ултравиолетовата и видима област на електромагнитния спектър с цел индуциране на фотолуминисценция преди и след излагане на рентгеново лъчение от конвенционален и синхротронен източник. Резултатите показват, че в някои от облъчените образци, в които е активиран Sm^{3+} йона, се наблюдава редуцирането му до Sm^{2+} .

В настоящата работа се обсъждат експерименталните резултати от гледна точка на установените модели за поведението на редки метали в стъкла, поликристални структури и в нанокристална стъклокерамика.

1. Andy Edgar, „Luminescent Materials“ in *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials* (S. Kasap, P. Capper Eds), 2006, Springer, Ch. 40 (983 – 995)

Авторите изказват благодарност на фонд НИ при ПУ за оказаната финансова подкрепа по проект НИ 13 ХФ 006, както и на Канадския синхротрон (CLS), гр. Саскатун за реализиране на част от изследванията.

СЪДЪРЖАНИЕ НА АЛКОХОЛ В СПИРТНИ НАПИТКИ

Т. Овчарова, Г. Антова, Т. Ненкова

*Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет,
ул. „Цар Асен“24, Пловдив 4000, temenuzhka_ovcharova@mail.bg*

Изследвано е съдържанието на алкохол във високо- и нискоалкохолни напитки от различен произход чрез стандартизирани спектрофотометрични и хроматографски методи. Установено е, че резултатите от двата метода са близки. Съдържанието на етанол и съответно на метанол в изследваните търговски продукти е в рамките на показателите, дадени в стандартите. Ракиите от домашен произход имат различен състав, но повечето от тях завишено съдържание, както на етанол, така и на метанол (допустими концентрации на метанол до 1% за гроздови и до 2.0% за плодови ракии). Във всички изследвани продукти е установено наличие на фузелови масла (по-висши алкохоли), като в домашните и в плодовите ракии тяхното количество е значително по-високо).

ХИМИЧНА И ЕНЗИМНА МОДИФИКАЦИЯ НА ИНУЛИН И ФРУКТООЛИГОЗАХАРИДИ

Н. Петкова, П. Денев

*Университет по хранителни технологии, Катедра Органична химия,
бул. Марица 26, 4002, e-mail: petkovanadejda@abv.bg*

През последните години химичната модификация на инулин и фруктоолигозахариди (окисление, естерификация, етерификация и др.) придоби изключителна популярност в индустриалното производство главно за получаване на повърхностно-активни вещества. Приложението на инулиновите деривати във фармацията, козметиката и техниката нараства поради тяхната безвредност и биоразградимост. Настоящият обзор има за цел да разгледа основните химични модификации на инулин: неутрална, анионна и катионна. Представени са новите тенденции в естерификацията на инулин. Освен класическата преестерификация с метилови естери и анхидриди на късо и дълговерижните мастни киселини, особено внимание е обърнато и синтез на инулинови естери с фенолни киселини (ферулова, *p*-хидроксиканелена и ванилова), водещо до получаване на нови биополимери с потенциална антиоксидантна активност. Разгледани са ензимно-катализираните реакции за синтез на инулинови естери с хидролази (протеази или липази), както и иновативен метод за ускорен ултразвуков химичен синтез. Представени са двата подхода на ензимна и химична естерификация на инулин и фруктоолигозахариди с цел проложението има като емулгатори в храните с повишена биологична активност.

Ключови думи: инулинови деривати, инулинови и ФОЗ естери, ензимна модификация, ултразвуков синтез

**СЪЗДАВАНЕ НА ТЕХНОЛОГИЯ ЗА ПРОИЗВОДСТВО НА СЕРУМ
ЗА ТРАНСДЕРМАЛНО ПРИЛАГАНЕ, ПРЕДНАЗНАЧЕН ЗА
ВЪЗСТАНОВЯВАНЕ НА ЕКСТРАЦЕЛУЛАРНИЯ МАТРИКС
НА КОЖАТА ПРИ ЧОВЕКА**

Н. Солаков

*Пловдивски университет „Паисий Хилендарски, Химически факултет,
ул. „Цар Асен“24, Пловдив 4000, nsoffice@abv.bg*

С развитието на козметичната индустрия все по-голям интерес представлява разработването на продукти, съдържащи биологично-активни вещества за трансдермално депониране в кожата. Търсенето на ефективна комбинация от вещества, повлияващи възстановяването на екстрацелуларния матрикс (ЕЦМ) на кожата, е основен приоритет на създателите на продукти от висшата козметика. Този вид козметика се отличава от масово използваната макиажна по отношение на концентрацията и вида на биологично-активните компоненти, съдържащи се в нея. При висшата козметика тези вещества са обработени така, че да могат да проникват навътре в кожата. Някои от тях могат да достигнат нивото на мезодермата и хиподермата. В тази козметика транспортните вещества са подбрани така, че да се смесват без проблем с веществата, намиращи се естествено в кожата. В същото време е обърнато внимание на данните, свързани с предизвикване на алергична реакция на кожата, като целта е крайният продукт да не предизвиква такава.

В настоящата работа разглеждаме пътя за създаването на такъв продукт от идеята до производствения процес. Представяме алгоритъма, необходим за създаване на козметичен продукт за възстановяване на екстрацелуларния матрикс на кожата. Разглеждаме структурата на различните слоеве на кожата, барьерните им свойства, клетъчния метаболизъм на колагеновите белтъци от доставката на нутриентите до омрежването в извънклетъчното пространство, за да изясним кои са веществата, водещи до стартиране синтеза на проколаген, отговарящи на изискванията за локално депониране.

Идеята е да създадем продукт, използващ само съставки с натурален произход, въздействащи върху синтеза на проколаген и възстановяване на ЕЦМ на кожата при човека. ЕЦМ е в основата на стабилността, стегнатия вид, хидратацията и храненето на клетките на кожата при човека. В настоящата работа ние разглеждаме пътя за създаването на такъв продукт, при който се стремим да достигнем пълен синхрон с биохимичните процеси, които протичат в различните слоеве в кожата.

ПОСТЕРНА СЕСИЈА

КОНКУРЕНТНА ЕЛЕКТРОФИЛНА ЦИКЛИЗАЦИЯ И ПРИСЪЕДИНИТЕЛНИ РЕАКЦИИ НА 4-ФОСФОРИЛИРАНИ АЛЕНКАРБОКСИЛАТИ

И. Парушев, И. Иванов, В. Христов

Шуменски университет „Епископ К. Преславски“,
Факултет по природни науки, Катедра по органична химия и технология,
9700 Шумен, ул. Университетска 115, E-mail: parushev.chem@abv.bg

Като част от нашите дългосрочни изследвания върху реакциите на електрофилна циклизация на 1,3-бифункционализирани алени, ние синтезирахме и изучихме електрофилните реакции на 4-фосфорилирани аленкарбоксилати [1].

Изследвани са реакциите на 4-фосфорилирани аленкарбоксилати с електрофилни реагенти като бром, сулфурил хлорид, бензенсулфанил хлорид и бензенселанил хлорид, при което е установено, че се получават разнообразни ненаситени хетероциклени и ациклени съединения в зависимост от вида на заместителя при фосфорилната група и електрофилния реагент. Така например, реакциите на алкил 4-(диметоксифосфорил)-алка-2,3-диеноати с електрофилни реагенти протичат с едновременното участие като съседни групи на фосфонатната и естерната функции в *5-endo-trig* циклизация с получаването на смес от 2,5-дихидро-1,2-оксафосфоли и фуран-2(5*H*)-они. От друга страна взаимодействията на алкил 4-(дифенилфосфорил)-алка-2,3-диеноати с електрофилни реагенти протичат *хемо-*, *регио-* и *стерео-* селективно с получаването на (3*E*)-3,2-адукти.

Благодарности

Настоящата работа е част от научно-изследователски проекти № РД-08-243/2013 год. и № РД-08-208/2014 год., които се финансират от фонд „Научни изследвания“ на ШУ „Еп. Константин Преславски“, както и на Проект ВГ051РО001-3.3.06-0003 „Изграждане и устойчиво развитие на докторанти, постдокторанти и млади учени в областта на природните, техническите и математическите науки“.

[1] Ivanov, I. K.; Parushev, I. D.; Christov, V. Ch. Bifunctionalized allenes. Part XI. Competitive Electrophilic Cyclization and Addition Reactions of 4-Phosphorylated Allenecarboxylates, *Heteroatom Chem.* **2014**, 25, 60 – 71.

ЕЛЕКТРОФИЛНИ РЕАКЦИИ НА ФОСФОРИЛИРАНИ А-ХИДРОКСИАЛЕНИ

И. Исмаилов, И. Иванов, В. Христов

Шуменски университет „Епископ К. Преславски“,
Факултет по природни науки, Катедра по органична химия и технология,
9700 Шумен, ул. Университетска 115, E-mail: ismail78@abv.bg

Изследвани са реакциите на фосфорилирани α -хидроксиалени със защитена и незащитена ОН група с участието на различни електрофилни реагенти (сулфурил хлорид, бром, бензенсулфанил и бензенселанил хлорид), като е установено, че протичат с получаване на разнообразни хетероциклени и ненаситени съединения [1].

Показано е, че взаимодействието на 1-хидроксиалкил-заместените 1,2-алкадиенфосфонатите със защитена и незащитена ОН група с електрофили протича *региоселективно* с 5-*endo-trig* циклизация и анхимерното съдействие като вътрешен нуклеофил само на фосфонатната група с получаване 2,5-дихидро-1,2-оксафосфол-2-они. Електрофилните реакции на 1-хидроксиалкил-заместените аленил фосфин оксидите със защитена и незащитена ОН група протичат с получаването на смес от продукти – 2,5-дихидро-1,2-оксафосфол-2-ониеви халогениди и (1E)-1-алкенил фосфин оксиди.

Благодарности

Настоящата работа е част от научно-изследователски проекти № РД-08-243/2013 год. и № РД-08-208/2014 год., които се финансират от фонд „Научни изследвания“ на ШУ „Еп. Константин Преславски“, както и на Проект BG051PO001-3.3.06-0003 „Изграждане и устойчиво развитие на докторанти, постдокторанти и млади учени в областта на природните, техническите и математическите науки“.

[1] Ismailov, I. E.; Ivanov, I. K.; Christov, V. Ch. Bifunctionalized Allenes. Part XV. Synthesis of 2,5-dihydro-1,2-oxaphospholes by Electrophilic Cyclization Reaction of Phosphorylated α -Hydroxyallenes. *Molecules* **2014**, *19*, 11056 – 11076.

ЕЛЕКТРОФИЛНА ЦИКЛИЗАЦИЯ И РЕАКЦИИ НА ПРИСЪЕДИНЯВАНЕ НА 3-ВИНИЛАЛЕНИЛ ФОСФИН ОКСИД

Х. Хасанов, И. Иванов, В. Христов

Шуменски университет „Епископ К. Преславски“, Факултет по природни науки, Катедра по органична химия и технология, 9700 Шумен, ул. Университетска 115, E-mail: hasi_@abv.bg

Като част от нашата изследователска програма върху химията на Р-функционализираните полиени, ние създадохме метод за синтез на 3-винилаленил фосфин оксид и изследвахме неговите реакции с различни електрофилни реагенти хлор, бром, йод, сулфанил и селаненил хлориди. Ние установихме, че взаимодействието на дифенилхлорофосфин с 3-метил-1-пентен-4-ин-3-ол в присъствие на триетил амин протича с междинно образуване на пропаргил фосфинит, който търпи [2,3]-сигматропна прегрупировка и получаване на дифенил 3-метил-1,2,4-пентатриенил фосфин оксид. Реакциите на електрофилна циклизация на получения фосфин оксид протичат с получаване на разнообразни хетероциклени и високо ненаситени съединения с участието на аленовата и/или 1,3-диеновата част на винилаленовата система, както и с участие на съседната фосфорилна и/или винилова група.

Показано е, че халогенирането на 3-винилаленовия фосфин оксид се извършва с междинно образуване на циклични фосфониеви соли, които след дехидрохалогениране дават (1E)-2-халогено-1,4-диенил фосфин оксиди. Намерено е, че хидролизата на оксафосфоловите халогениди се осъществява с разкъсване на Р-О връзката с получаване на (1E)-1,4-пентадиен-3-оли. Сулфанилирането на 3-винилаленовия фосфин оксид дава смес от цикличните – 2-фосфорил тиофен, 1,2-цикличен фосфониев хлорид и 3-метилен-1,4-пентадиенил фосфин оксид. Взаимодействието на 3-винилаленовия фосфин оксид с бензен селаненил хлорид се осъществява с два типа циклизация с получаване на смес от фосфорил-селенофен и оксафосфол-2-ониев хлорид.

Благодарности

Настоящата работа е част от научно-изследователските проекти № РД-08-243/ 2013 год. и № РД-08-208/ 2014 год., които се финансират от фонд „Научни изследвания“ на ШУ „Епископ Константин Преславски“.

Нови подходи при синтеза на биологично активни сукроестери

Р. Грудева, Н. Петкова, П. Денев

*Университет по хранителни технологии, Катедра „Органична химия,
бул. „Марица“ 26, 4002, e-mail: radka_grudeva@outlook.com,
petkovanadejda@abv.bg*

Сукроестерите представляват нейногенни повърхностно-активни вещества с важно значение в растителната защитата, медицината, козметиката и хранителната промишленост. Освен регламентираното им приложение като добавки в храните (емулгатори), те се утвърдиха и като вещества с потенциална антимикробната активност. Настоящият преглед има за цел да разгледа новите подходи прилагани при синтеза на естери на захарозата, характеризирани се с повишена биологична активност. Химичният синтез на сукроестери (каприлати, лаурати, миристати и палмитати) обикновено се осъществява в DMSO чрез преестерификация с винилови или етилови естери на съответните мастни киселини в присъствие на алкални катализатори. В настоящият обзор е направена сравнителна характеристика на новите химични и ензимни методи за естерификация на захароза. Подробно са разгледани ускореният ултразвуков химичен синтез на сукроестери, както и ензимна модификация, осъществена в присъствие на липаза, проведена под микровълново, ултразвуково въздействие и реакционната среда със суперкритичен въглероден диоксид. Представените нови подходи за получаване на биологично активни сукроестери имат за крайна цел преимущественото натрупване на моноестери, отличаващи се с най-висока антимикробна активност. Оценен е потенциалът на приложението на ултразвуковото въздействие при интензифициране на естерификационния процес.

Ключови думи: сукроестери, ултразвуков синтез, микровълнов синтез, ензимен катализ, антимикробна активност

СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНА АКТИВНОСТ НА НОВИ ЦИКЛИЧНИ КЕТОНИ ПОЛУЧЕНИ ПРИ РЕАКЦИЯ НА АЛФА АМИДОАЛКИЛИРАНЕ

Й. Стремски, Д. Георгиев, Д. Киркова, С. Статкова-Абегхе

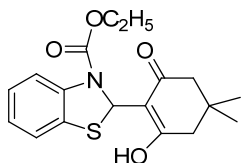
ПУ „П. Хилендарски“, Химически Факултет, Катедра Органична химия,
Пловдив, 4000, ул. „Цар Асен“ 24, e-mail: stremski@uni-plovdiv.net

Възможността азот-съдържащи хетероциклени съединения, като: тиазол, имидазол, оксазол и техните бензопроизводни, да проявяват свойства на циклични имини, открива разнообразни пътища за синтез на поредица техни производни. През последните двадесет години в научната група усещно се прилагат ацилиминиеви реагенти, получени от циклични имини и ацилхлориди за функционализиране на азотсъдържащи хетероциклени съединения.

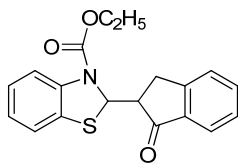
Целта на настоящата работа е приложение на ацилиминиеви реагенти на бензтиазол и бензимидазол с алкилхлороформиати като α -амидоалкилиращи реагенти спрямо различни циклични кетони: 1,3-циклохександиони, инданони и изследване на антимикробната активност на получените съединения.

При проведените от нас реакции на амидоалкилиране на циклични кетони установихме, че реакцията протича успешно с добри добиви (от 30% до 67%), при температура от 25 – 100°C, за време от 2 до 24 часа. В резултат на проведените изследвания са намерени условия за получаването на шест 2-заместени производни на бензотиазол и бензимидазол.

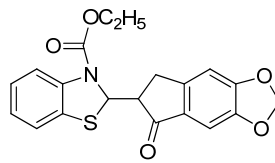
Изследвана е антимикробната активност на новосинтезираните съединения, като е използван дифузионен тест с агарови ямки (Perez et. al., 1990). Веществата са разтворени в 50% диметилсулфоксид (DMSO/H₂O) в концентрация 1mg/ml. Съгласно стандартите и препоръките, публикувани от Clinical Laboratory Standards Institute, ефектът на изследваните вещества, нанесени в количество 100µg, се отчита съобразно размера на зоната с намален или отсъстващ растеж.



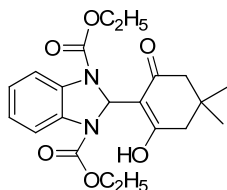
a) 67%



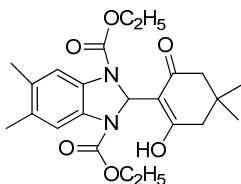
b) 39%



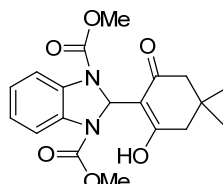
c) 40%



d) 54%



e) 60%



f) 44%

За веществата **d** и **f** е установен бактериостатичен ефект при *Enterobacter aerogenes* (ATCC 25029) в количество 200 µg. За вещества **e** (20mm), и **b** (20mm) е установен бактериостатичен ефект при *Escherichia coli* (ATCC 25922) в количество 100 µg. За вещества **a** (15mm) и **b** (14mm) е установен бактериостатичен ефект при *Bacillus cereus* в количество 100 µg. Всички изследваните вещества са резистентни срещу *Candida albicans* (ATCC 10231) в количество 100 µg.

Изследванията са осъществени с финансовата подкрепа на поделение „Научна и приложна дейност“ при ПУ „П. Хилендарски“, договор № НИ 13 ХФ 006.

**COMPARATIVE CHARACTERIZATION OF ESSENTIAL OIL
AND POLYPHENOLS IN MENTHA PIPERITA,
MENTHA CITRATA AND MENTHA SUAVEOLENS**

S. Dagnon, D. Bojilov, A. Ustichkov, K. Koev, I. Dincheva

*ПУ „Паусий Хилендарски“, Химически Факултет
Пловдив 4000, ул. „Цар Асен“ 24, e-mail: dagnon@uni-plovdiv.bg*

This investigation was conducted to characterize and compare the chemical composition of essential oil and polyphenols in three cultivated mint species *M. piperita*, *M. citrata* and *M. suaveolens* as well as their radical scavenging potential. An approach is proposed, which integrates fingerprint profiling, pattern recognition and quantification of major components of essential oil and polyphenols to describe the herbs and to evaluate their taxonomic discrimination. Carvone was found in high amount in *M. suaveolens* (10mg/100g herb). Hence it could refer to the carvone rich chemotype. The essential oil and polyphenols composition showed quantitatively and qualitatively differences between *M. piperita* and *M. citrata* species. *M. citrata* contained the highest amount of polyphenols (4.22mg.g⁻¹DM rosmarinic acid) and correspondingly the highest radical scavenging potential toward DPPH• (IC₅₀= 12.13 ± 1.45µg.ml⁻¹). The pattern recognition procedure showed the higher potential of essential oil composition as a tool for discrimination between species than of polyphenol components.

We acknowledge financial support from the Fund for scientific research of Plovdiv University – NI 13 FC 006.

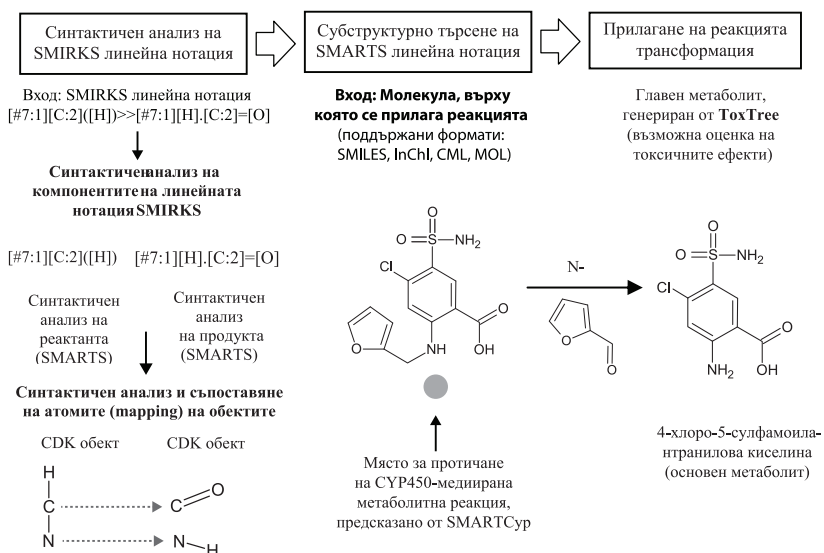
КОМПЮТЪРНО ПРЕДСТАВЯНЕ НА ХИМИЧНИ РЕАКЦИИ И ТРУКТУРНИ ТРАНСФОРМАЦИИ С АМБИТ-SMIRKS. ПРИЛОЖЕНИЯ ПРИ ПРЕДСКАЗВАНЕ НА МЕТАБОЛИТИ

Н. Кочев*, С. Аврамова*, Н. Желязкова**

* Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Химически факултет,
ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, nick@uni-plovdiv.net

** Идеяконсулт ООД, София 1000, ул. „Ангел Кънчев“ 4

Ambit-SMIRKS е разширение на Java библиотеката Ambit-SMARTS [1], и двете част от проекта Ambit2 [2]. Функционалността на Ambit-SMIRKS осигурява изпълнението на две основни задачи: (1) синтактичен анализ на SMIRKS линейни нотации, описващи генерични реакции и структурни трансформации, и (2) прилагане на тези реакции върху зададени от потребителя химически обекти.



Фигура 1. Приложение на Ambit-SMIRKS за предсказване на метаболизма на **Фуросемид**

При разработването на софтуерните модули е използвана библиотеката CDK [3]. Модулът Ambit-SMIRKS поддържа пълния синтаксис на SMARTS за 50

описание на реакции и използва реализирания в Ambit-SMARTS ефикасен алгоритъм за субструктурно търсене.

Когато трансформациите могат да бъдат приложени на няколко места в молекулата, Ambit-SMIRKS работи в четири основни режима, при които намерените подструктури: (i) не се припокриват; (ii) не са идентични; (iii) не са хомоморфни; (iv) режим, при който се избира само един структурен мотив или режим, зададен от потребителя.

Освен дефинираните в Daylight спецификации на езика SMARTS, Ambit-SMARTS поддържа допълнителни разширения на синтаксиса, служещи за синхронизация с модификации на SMARTS, направени при други софтуерни пакети (OpenEye, MOE и OpenBabel). Тези разширения могат да бъдат активирани по желание на потребителя.

Модулът SMIRKS се използва за получаване на метаболитните структури от софтуера Toxtree (версия 2.5.0 и по-висока) [4], след като местата в молекулата, на които могат да протекат метаболитните реакции, са предсказани от SMARTCup [5]. Toxtree е гъвкаво приложение с отворен код, което предсказва множество различни токсични ефекти, използвайки структурни правила, класифицирани в дърво на решенията. Моделът SMARTCup (цитохром P450-медиран лекарствен метаболизъм) е разработен от Patrik Rydberg [5] и е включен в Toxtree след версия 2.1.0.

Софтуерният модул Ambit-SMIRKS е достъпен като Java библиотека, OpenTox алгоритъм и API съвместима уеб услуга, и може да бъде тестван на следната уеб страница: <http://apps.ideaconsult.net:8080/ambit2/depict/reaction>. Онлайн версия на Toxtree (с активни менюта за предсказване на местата за протичане на метаболитни реакции и получаващите се метаболити) е достъпна на <http://toxtree.sourceforge.net/predict>.

Библиография

1. Jeliazkova, N.; Kochev, N.; AMBIT-SMARTS: Efficient Searching of Chemical Structures and Fragments; Mol. Inf. 2011, 30, 707 – 720.
2. Jeliazkova N.; Jeliazkov V.; AMBIT RESTful web services: an implementation of the OpenTox application programming interface, Journal of Cheminformatics 2011, 3:18.

3. Steinbeck, C.; Han, Y.; Kuhn, S.; Horlacher, O.; Luttmann, E.; Willighagen, E.; The Chemistry Development Kit (CDK): An Open-Source Java Library for Chemo- and Bioinformatics; J. Chem. Inf. Comput. Sci., 2003, 43, 493 – 500,
4. <http://toxtree.sourceforge.net> (последен достъп до страницата: ноември, 2014)
5. Rydberg, P.; Gloriam, D.; Zaretski, J.; Breneman, C.; Olsen, L.; SMARTCyp: A 2D Method for Prediction of Cytochrome P450-Mediated Drug Metabolism; ACS Med. Chem. Lett., 2010, 1 (3), 96 – 100.

EXPLORATORY DATA ANALYSIS ON QSAR/QSPR MODELING AND TAUTOMERISM

V. Paskaleva*, **N. Kochev****, **O. Pukalov****, **N. Jeliaskova*****

* *University of Plovdiv, Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry, vesity@uni-plovdiv.net*

** *University of Plovdiv,*

Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry

*** *Ideaconsult Ltd, 4 A. Kanchev str., Sofia 1000, Bulgaria*

Quantitative Structure–Activity Relationship (QSAR) and Quantitative Structure–Property Relationship (QSPR) are modeling techniques used to predict the end-points (physicochemical properties and biological activities) of chemical compounds of interest. The latter helps the prioritization of molecules for further synthesis, testing, registration etc [1]. The models are strongly dependent on structural information. While the structural representation of chemical compounds is considered as well established Chemoinformatics activity, some problems remain in the context of structure representation handling of the tautomers. Computer-based applications often handle tautomers as different structures because of their different topological representation. A number of chemoinformatics methods like fingerprint generation and descriptors calculation are impacted by the tautomerism which suggest also an impact on QSAR/QSPR methods application. In this context we study the influence of tautomeric structures over the model building. First we build models for various structure sets and target end-points of interest and subsequently we rebuild the same models including the tautomeric information in the training set. The obtained results are compared and analyzed in order to determine which chemoinformatics tasks are impacted by the tautomerism. The tautomer generation was done using software module AMBIT-Tautomer [3] developed in our group. It is part of the open-source software platform AMBIT [4, 5]. The models were built with data sets for Tetrahymena Pyriformis represented in references [6] and [7] and other end-points.

- [1] K. Roy, I. Mitra, S. Kar, P. K. Ojha, R. N. Das, H. Kabir, Comparative Studies on Some Metrics for External Validation of QSPR Models, *J. Chem. Inf. Model.*, 2012, 52 (2), pp 396 – 408.

- [2] IUPAC Compendium of chemical terminology (electronic version). <http://goldbook.iupac.org/T06252.html>, accessed 18 Nov, 2011.
- [3] Kochev, N. T., Paskaleva, V. H. and Jeliaskova, N. (2013), *Ambit-Tautomer: An Open Source Tool for Tautomer Generation*. *Mol. Inf.*, 32: 481–504. doi: 10.1002/minf.201200133.
- [4] N. Jeliaskova, J. Jaworska, A. P. Worth, in *In Silico Toxicology: Principles and Applications (Issues in Toxicology)* (Ed: M.Cronin), Royal Society of Chemistry, London, 2010, pp. 408 – 443.
- [5] <http://ambit.sourceforge.net>, accessed 25 Oct 2012.
- [6] Hao Zhu, Alexander Tropsha, Denis Fourches, Alexandre Varnek, Ester Papa, Paola Gramatica, Tomas Öberg, Phuong Dao, Artem Cherkasov, Igor V. Tetko, *Combinatorial QSAR Modeling of Chemical Toxicants Tested against Tetrahymena pyriformis*, *J. Chem. Inf. Model.*, 2008, 48 (4), pp. 766 – 784.
- [7] Cheng, F., Shen, J., Yu, Y., Li, W., Liu, G., Lee, W., Tang, Y., *In silicoprediction of Tetrahymena pyriformis toxicity for diverse industrial chemicals with substructure pattern recognition and machine learning methods*, *Chemosphere*, 82: 1636 – 1643, 2011.

ХИДРОТЕРМАЛНО АКТИВИРАН ZnO ЗА ФОТОКАТАЛИТИЧНО ОБЕЗЦВЕТЯВАНЕ НА ЗАМЪРСЕНА С ТЕКСТИЛНО БАГРИЛО ВОДА

М. Шипочка*, Л. Димитров, И. Стамболова*, К. Миленова***,
В. Блъсков*, Д. Стоянова*, А. Елиаз*****

**Институт по обща и неорганична химия, БАН,
ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 11, София 1113, България, e-mail: mglal@abv.bg*

***Институт по минералогия и кристалография „Акад. И. Костов“, БАН,
ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 107, София 1113, България*

**** Институт катализ, БАН,
ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 11, София 1113, България*

Прахообразен ZnO беше получен чрез утаяване с последваща хидротермална обработка. Утайтелят беше добавен на капки към цинков ацетат до достигане на pH=13. Полученият зол беше обработен хидротермално при температура 140°C. Полученото прахообразно вещество беше анализирано чрез следните анализи: рентгенофазов анализ (XRD), инфрачервена спектроскопия (IR), както и ВЕТ анализ за определяне на специфична повърхност и разпределение на порите по размер.

Според рентгенофазовият анализ е получена добре кристализирана вюрцитна фаза, несъдържаща примеси от други фази. Този резултат бе потвърден и от данните от инфрачервения спектроскопски анализ. Образците притежават както микропори, така и мезопори в интервала от 2 до 22 нанометра.

Измерванията на фотокаталитичната активност бяха проведени с воден разтвор на моделно азо багрило Реактив Блек 5 (RB 5, концентрация 20 ppm) използвано реално в текстилната промишленост. Експериментите бяха проведени под действието на ултравиолетова светлина. Реакцията на обезцветяване на багрилото е от псевдо-първи порядък. Степента на обезцветяване за период от 2 часа е 65% със скоростна константа е $8,5 \cdot 10^{-3} \text{ мин}^{-1}$.

Получените резултати показват, че прилагането на хидротермална активация на зола е перспективен метод за получаване на добре кристализиран наноразмерен ZnO, проявяващ добра фотокаталична ефективност за обезцветяване на текстилно азо багрило.

ВЛИЯНИЕ СЪСТАВА НА КАТАЛИЗАТОРНИЯ КОМПЛЕКС ВЪРХУ КАТАЛИТИЧНАТА АКТИВНОСТ НА CU-MN-CR СМЕСЕНИ ОКСИДИ

Е. Коленцова и Д. Димитров

*Аграрен Университет – Пловдив,
Факултет по Растителна защита и агроекология,
бул. „Менделеев“ 12, Пловдив 4000, elitsa_kolentsova@abv.bg*

Обект на настоящата работа са катализатори, съдържащи нанесени мед-манган-хром смесени оксиди. Всички образци са получени чрез импрегниране на меден нитрат, манганов нитрат и хромен анхидрид върху носител $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Изследвано е влиянието на атомното съотношение Cu-Mn-Cr в активната фаза по отношение на пълното окисление на въглероден оксид (CO), метанол (MeOH) и диметиллов етер (ДМЕ). На основата на предварително получени резултати за системата Cu-Mn/ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ са разработени две серии от образци (i) с атомното отношение Cu:Mn 2/1 и (ii) с атомното отношение Cu:Mn 1/5. И при двете серии съдържащият се в образците манган е заменен с хром в целия концентрационен интервал от 20 до 100%. При физикохимичното охарактеризиране на катализаторите са използвани рентгеноструктурен и термичен анализ, а специфичната повърхност е определена по метода на БЕТ.

Каталитичните измервания са проведени на поточна апаратура с изотермичен реактор. Активността на катализаторите е оценена по степента на окисление на газовете, преминали през катализаторния слой, в проценти. Установено е, че съдържанието на хром в активната фаза оказва съществено влияние върху каталитичната активност, като това влияние е различно както за двете групи катализатори, така и за отделните компоненти в газовата смес. При окислението на CO първата група катализатори показват по-висока активност, като и при двете групи заместването на мангана с хром води до драстично намаляване на активността. При окислението на диметиллов етер се наблюдава обратната тенденция – с нарастване съдържанието на хром активността на образците нараства, като тази тенденция е изразена значително по-силно при образците от втората група. Нарастването на съдържанието на хром оказва несъществено влияние върху окислението на метанол и при двете групи катализатори. Направен е изводът, че най-подходящи катализатори за едновременното окисление на CO, метанол и ДМЕ са тези с атомно отношение Cu:Mn(Cr) 1:5, в които над 60% от мангана е заменен с хром.

САМООРГАНИЗАЦИЯ ПРИ ЕЛЕКТРООТЛАГАНЕ НА ДВОЙНИ СПЛАВИ ОТ СРЕБРО, КАЛАЙ И АНТИМОН

А. Гъзова*, И. Кръстев, Л. Петков* и Ц. Доброволска****

* Химикотехнологичен и металургичен университет, гр.София

** Институт по Физикохимия – БАН, гр. София, annelia@bitex.bg

Сребърните покрития са широко използвани в съвременната техника, благодарение на свойствата на този метал – отлична електрическа проводимост, висока отразяваща способност, каталитична и антибактериалната активност. Сплавянето на сребро с малки количества от различни метали има за цел подобряването на някои от физико-механичните му свойства като твърдост, съпротивление, устойчивост към потъмняване и др.

От фундаментална гледна точка покритията с достатъчно количество от легиращия елемент също са интересни, тъй като при определени условия по време на съвместното отлагане на двата метала различни фази от сплавта се подреждат в пространствено – временни структури върху повърхността на катода. Тези явления са изследвани при електроотлагането на сребърни сплави с антимон, индий, бисмут, кадмий, а в случая с калай – от електролити, съдържащи свободен цианид [1].

Сплавта антимон и калай е слабо изследвана. Познанието за поведението на двата метала в сребърните сплави позволи изследването на подходящи електролити за получаването на самостоятелна двойна сплав и последващо изследване на свойствата на покритията.

В настоящето изследване е направен опит да се разработи без цианиден електролит за отлагане на компактни сребърно-калаени, сребърно-антимонови и антимон-калаени покрития, с цел изследване техните състав, структура и свойства; както и да се намерят условията за поява и наблюдение на разнообразие от периодични пространствено-временни структури, т.е. явления на самоорганизация при тези сплави.

Благодарности

Авторите са благодарни за финансовата помощ на проект BG051PO001-3.3.06-0038, финансиран от Оперативна програма за развитие 2007 – 2013 г.

1. I. Krastev and Ts. Dobrovoltska, Pattern formation during electrodeposition of alloys, *J. Solid State electrochemistry* (2013).

ИЗСЛЕДВАНЕ НА ПРОЦЕСА НА ЕЛЕКТРОХИМИЧНО ПОЛУЧАВАНЕ НА НАТРИЕВ ХИПОХЛОРИТ

К. Йосифов, Л. Петков

*Химикотехнологичен и металургичен университет,
Катедра Неорганични и електрохимични производства,
София 1756, Климент Охридски 8, kirilyosifov@abv.bg*

Електрохимичният метод за получаване на NaClO е намерил приложение в предвид предимствата, които предлага-малък разход на труд и химикали, лек контрол и отсъствие на необходимостта от използване на токсичен газ – хлор. Процесът на получаване на натриев хипохлорит се характеризира със странична (паразитна) реакция на редукция на крайното съединение върху катода, което води до намаляване върху ефективността по ток и увеличаване разхода на електроенергия. Използваният метод за решаването на проблема чрез въвеждането на съединения на Cr^{6+} е неекологичен. Негова алтернатива се явява намирането на катоден материал, върху който успоредно протичащата реакция на редукция на хипохлорита – отделянето на водород, се ускорява, а скоростта на редукцията на хипохлорита не се променя. В предварителни изследвания беше установено, че използването като катод на стъкловиден въглерод модифициран със наноразмерни оксиди на церия, циркония и итрия оказват благоприятно влияние върху основните характеристики на процеса – добив по ток, коефициент на превръщане и др. Цел на настоящата работа се явява по-системното изучаване на наблюдавания ефект. Изследвани са следните количествени характеристики – концентрация на NaClO , коефициент на превръщане, специфичен добив, добив по ток, като получените данни са сравнени с резултатите върху други катодни материали – желязо, графит, немодифициран въглерод. Установено е че стойностите на добива по ток за модифициран въглерод превишават 5 – 10% стойностите получени за другите катодни материали. Коефициентът на превръщане възлиза на 2,88%, а специфичния добив 0,2 gr/Wh, добивът по ток 85,5%, разходът на енергия 5,06 Wh.g⁻¹. Съответните стойности например, за катод желязо възлизат на 2,64%, 0,18 gr/Wh, 73.9%, 5,57 Wh.g⁻¹.

В резултат на изследванията може да се направи заключение, че модифицирания стъкловиден въглерод с Ce, Zr, Y, може да бъде алтернатива на съединенията на Cr^{6+} .

Авторите благодарят на проект: BG051PO001-3.306-0038

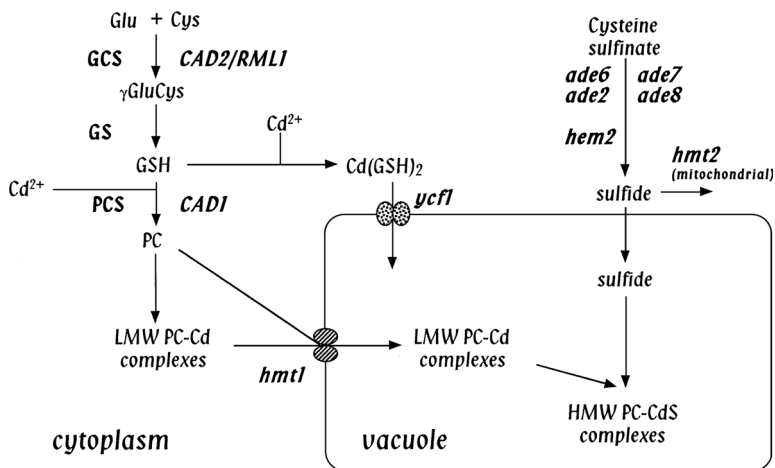
СКРИЙНИНГ НА ФИТОХЕЛАТИНИ И ИЗО-ФИТОХЕЛАТИНИ В *CLINOPODIUM VULGARE* L. В РЕЗУЛТАТ НА СТРЕС С Cd, Cu, Zn И Pb: В ТЪРСЕНЕ НА НОВИ ФОРМИ

К. Бърдаров*, **М. Найденов****, **К. Амирова****, **Р. Джингова***

*СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по химия и фармация,
ул. „Джеймс Баучер“ 1, София 4000, krum.bardarov@chem.uni-sofia.bg

**Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“, Биологически факултет,
ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000

Фитохелатините са клас малки пептиди, изградени от γ -GluCys дипептид-на последователност с повторения от 1 (глутатион) до 11 (PC11) и крайна аминокиселина – глицин. Когато крайната аминокиселина е различна от глицин, е прието пептидите да се наричат изофитохелатини. Синтезират се в растенията от ензимната система фитохелатинсинтетаза и изпълняват функция на метал-детоксикиращи лиганди. След комплексообразуване с металите комплексите се отвеждат във вакуоли, където металите не могат да упражняват своето токсично действие.



Целта на настоящата работа е да проверим, за първи път, кои фитохелатини присъстват в различни органи на растението *clinopodium vulgare* L., отгледано върху почви с дозирано количество на четири токсични елемента – Cd, Pb, Cu и Zn поотделно. За целта е използван течнохроматографски метод с мас-

спектрална детекция, а идентифицирането на фитохелатините е извършено посредством точна маса и фрагментните спектри на $[M+H]^+$ йона. Открити са следните представители: isoGSH(Cys), isoPC2(Cys), isoPC3(Cys), CysGSH, CysPC2, CysPC3, GSHdesGly, PC2desGly, PC3desGly, PC4desGly, CysGSHdesGly, CysPC2desGly, CysPC3desGly, isoGSH(Ala), isoPC2(Ala), isoPC3(Ala), isoPC4(Ala), CysisoGSH(Glu) CysisoPC2 (Glu), CysisoPC3(Glu), CysisoPC4(Glu).

СИНТЕЗ И АНТИПРОЛИФЕРАТИВНО ДЕЙСТВИЕ НА 1,3-ДИХИДРОКСИМЕТИЛ-(9'-ФЛУОРЕН)-СПИРО-5-ХИДАНТОИН И НЕГОВИЯ Cu(II) КОМПЛЕКС В *IN VITRO* УСЛОВИЯ

С. Генова*, **М. Казакова****, **Я. Феодорова****,
М. Маринов***, **В. Сарафян****, **Н. Стоянов*****, **П. Маринова***

*Пловдивски университет „Паисий Хилендарски, Химически факултет,
ул. „Цар Асен“ 24, Пловдив 4000, stelcova@abv.bg

**Медицински университет-Пловдив, Катедра Медицинска биология,
бул. „Васил Априлов“ 15А, Пловдив 4002

***Аграрен университет – Пловдив, бул. „Менделеев“ 12, Пловдив 4000,
Филиал-Разград, ул. „Априлско въстание“ 47, Разград 7200

Хидантоините са хетероциклени органични съединения, които са известни още като имидазолидини. Те съдържат две amino групи на 1-во и 3-то място и две карбонилни групи на 2-ро и 4-то място свързани в общ петчленен пръстен. Въглеродният атом, който е общ за двата цикъла се нарича спиро-С-атом или С-5 атом. Друг клас производни на хидантоините са тези с 9'-флуоренов заместител, свързан със спиро С-5 атома от хидантоиновия пръстен, наричани флуоренилспирохидантоини.

Това са органични съединения, които се използват в медицината основно като алдозоредуктазни инхибитори и именно това ги прави изключително полезни при лечение на хронични усложнения на болни от диабет. От изключителна важност за медицинската практика е фактът, че такъв тип съединения притежават антитуморно, антиепилептично, антиаритмично и антиконвулсивно действие.

В това научно съобщение се представя метод за синтез и антипролиферативно изследване на **1,3-дихидроксиметил-(9'-флуорен)-спиро-5-хидантоин (L)** и неговия Cu(II) комплекс в *in vitro* условия.

Структурата на органичното вещество, както и на комплекса му е доказана с помощта на редица спектроскопски методи, а именно UV-Vis, ИЧ, FT-IR ATR и Раман спектроскопия. Допълнително структурата на лиганда е изследвана и с рентгеноструктурен анализ. За L елементарната клетка е отнесена към моноклинна кристална система и пространствена група $P2_1/c$. Потенциалният цитотоксичен ефект на **1,3-дихидроксиметил-(9'-флуорен)-спиро-5-хидантоин** и на Cu(II) комплекса му е проучен върху човешки туморни клетъчни линии – ретинобластомна (**WERI-Rb-1**) и меланомна (**A2058**). За оценка на клетъчната пролиферация и жизнелост е използван комерсиалния Cell Proliferation Reagent – WST-1 тест (Cat. No11 644 807 001, Roche Applied Science). Дискутира се струк-

турата и биологичното действие на синтезирания заместен флуоренилспирохидантоин и неговия **Cu(II)** комплекс.

Благодарности

Авторите изказват своята благодарност на Фонд „Научни изследвания“ (Договор **ДФНИ БО1/0014** и на Фонд НИ към ПУ, договор **НИ-13-ХФ 006**) за оказаната финансова помощ, с която е осъществено настоящето изследване, както и на доц. д-р Борис Шивачев, Институт по Минералогия и кристалография – БАН и доц. д-р Пламен Пенчев, ПУ „Паисий Хилендарски“ за спектралните измервания.

КАТАЛИТИЧНО И НЕКАТАЛИТИЧНО ОКИСЛЕНИЕ НА СУЛФИДНИ ЙОНИ ОТ МОДЕЛНИ РАЗТВОРИ НА МОРСКА ВОДА

Н. Дерменджиева*, Е. Разказова-Велкова*, В. Бешков*

**Институт по инженерна химия – Българска Академия на Науките,
ул. „Акад. Г. Бончев“ 103, София 1113, nastemi1@abv.bg*

Изследвано е окислението на сулфидни йони от моделни разтвори на морска вода с и без катализатор. Използваният катализатор е циркониев диоксид (ZrO_2), чиято повърхност е охарактеризирана чрез адсорбция по йод. Експериментите са проведени при различни начални концентрации на сулфидните йони и температури и два режима на работа – при непрекъснатата аерация и при разбъркване с постоянна скорост. Скоростта на окисление при процеси с непрекъснатата аерация е два пъти по – висока от тази при процеси на разбъркване с постоянна скорост без аерация. При наличие на катализатор и процес с непрекъснатата аерация сулфидните йони се окисляват за 1 час при $60^\circ C$ и за 2 часа при $20^\circ C$, като продуктите на реакцията са 90% сулфатни йони, спрямо изходното количество сулфиди. При същите температури и концентрации, но при провеждане на процесите с разбъркване без аерация се получават значително количество междинни съединения – устойчиви редуктори и поради тази причина този вариант е неприемлив от екологична гледна точка. Скоростта на окисление на процесите проведени без катализатор е с 50 – 80% по-ниска и при двата режима на работа.

ЕНЕРГИЙНИ ПАРАМЕТРИ НА ГОРИВНА КЛЕТКА НА БАЗАТА НА ОКИСЛЕНИЕ НА СУЛФИДНИ ЙОНИ

С. Стефанов, Д. Миленкова, В. Бешков

*Институт по инженерна химия – БАН,
ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 103, София 1113, stefanmartinov@yahoo.com*

Присъствието на разтворен сероводород в дълбочинните води на Черно море представлява сериозен екологичен проблем, поради което под 200 метра морето е практически мъртво. Настоящата работа е част от мащабен проект за премахване на сулфидите чрез електрохимично окисление в горивна клетка, при което едновременно с очистването се получава и електроенергия. Текущото изследване има за цел да се охарактеризират енергийните параметри на горивната клетка при различни условия, близки до реалните, с цел подобряване ефективността на работата на клетката.

Ключови думи: сероводород, окисление, горивна клетка

ФАЗОВО РАВНОВЕСИЕ В ДВУФАЗНИ ВОДНИ СИСТЕМИ ВUОН – K₂HPO₄/KH₂PO₄

Д. Миленкова, Д. Янков

*Институт по инженерна химия – БАН,
ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 103, София 1113, dmilenkova23@gmail.com*

Двуфазните водни системи са алтернативен и ефективен подход за разделяне, концентриране и пречистване на биоматериали чрез разпределяне между две течни фази. Съществуват различни типове двуфазни водни системи – полимер/полимер, полимер/сол, ПАВ/сол, алифатни алкохоли/сол и др. В настоящата работа е изследвано фазовото равновесие на двуфазни водни системи, съставени от бутанол и калиев дихидроген и/или дикалиев хидроген фосфати. Експериментално са построени бинаodalните криви при 25°C и различни стойности на рН и са определени съставите на двете фази за различни равновесни системи.

Ключови думи: двуфазни водни системи, фазово равновесие, бинаodalни криви

Благодарности

Авторите изказват своята благодарност на ФНИ, Министерство на образованието и науката за финансиране на настоящата работа в рамките на Проект Б-01/23.

АЗБУЧЕН ПОКАЗАЛЕЦ

В		Л	
Војилов.....	50	Лазарова.....	22
Р		М	
Paskaleva.....	54	Миленкова.....	66
А		О	
Аврамова.....	51	Овчарова.....	39
Асанова.....	27	П	
Б		Парушев.....	11, 44
Бърдаров.....	24, 60	Петкова.....	40
В		Петрова.....	14
Вълев.....	17	С	
Г		Солаков.....	41
Гандова.....	16	Стефанов.....	65
Генова.....	62	Стефанова.....	23
Грудева.....	47	Стоева.....	31
Гъзова.....	58	Т	
И		Тенева.....	21
Иванова.....	32	Х	
Исмаилов.....	12, 45	Хасанов.....	13
Й		Хасанов.....	46
Йосифов.....	59	Христов.....	18
К		Ч	
Киркова.....	48	Чакърва.....	26
Коленцова.....	57	Чакърва-Димитрова.....	28
Костова.....	38	Ш	
Кънчева.....	34	Шипочка.....	56

ЗА ХИМИЧЕСКИЯ ФАКУЛТЕТ

Химическият факултет е измежду първите факултети, създадени още при основаването на Пловдивския университет. Факултетът е разположен в централната сграда на Университета, намираща се в центъра на Пловдив. Той разполага с 15 химични лаборатории, три компютърни зали, вътрешна мрежа между катедрите, няколко сървъра за химични приложения и интернет комуникация. В Химическия факултет работят квалифицирани специалисти, което му позволява да провежда учебна и научноизследователска работа на високо равнище.

Студентите, придобили знания в Химическия факултет, се подготвят за следните дейности: преподаване в университет и средно училище; функционални и научноприложни изследвания в сферата на химията и гранични на нея области, както и по проблеми, свързани с опазване на околната среда; развойна дейност, разработване, внедряване и усъвършенстване на технологии; разработване на нови и усъвършенстване на съществуващи методи за контрол и изпитания на материали, суровини, полупродукти в промишлеността, медицината, биохимията, селското стопанство, техниката, екологията; обслужване на производствената дейност в химични, хранително-вкусови, металургични и други производства, в които ролята на химията е доминираща.

С любезното съдействие на „КАРМЕЛА 2000“ ООД.

КАРМЕЛА 2000 ООД,
гр. Велико Търново
ул. Опълченска 62
тел.: +359 62 63 58 15
факс: +359 62 63 59 34
e-mail: office@karmela.eu
http://www.karmela.eu/



WEB АДРЕСИ

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ „ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ“

<https://uni-plovdiv.bg>

СПЕЦИАЛИЗИРАН САЙТ НА ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

<http://argon.uni-plovdiv.bg>

СТУДЕНТСКИ СЪВЕТ при ПУ „ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ“

<http://ss-pu.org/>

Научна конференция „ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА В ХИМИЯТА“

<http://scc.uni-plovdiv.net>